



TITLE:

スクィーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法による量子系の半古典的記述 - Berryの位相としてのMaslovの位相のあらわれ (Dissertation_全文)

AUTHOR(S):

津江, 保彦

CITATION:

津江, 保彦. スクィーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法による量子系の半古典的記述 - Berryの位相としてのMaslovの位相のあらわれ. 京都大学, 1993, 博士(理学)

ISSUE DATE:

1993-03-23

URL:

<https://doi.org/10.11501/3091454>

RIGHT:

スクイーズされたコヒーレント状態を用いた
時間依存変分法による量子系の半古典的記述
—Berry の位相としての Maslov の位相のあらわれ—

津江 保彦

京都大学理学部 物理学第 2 教室

ABSTRACT

量子的揺らぎの効果を高次まで取り込んで量子系を古典的に記述するために、スクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法の枠組みが構築される。このとき、時間依存ハートレー・フォック理論で展開された正準変数条件に注意が払われ、“古典運動”、“量子的揺らぎ”の運動方程式は古典正準方程式に定式化される。こうして、量子系の時間発展を記述することが、適当な初期条件のもとで古典的運動方程式を解くことに帰着される。さらに、量子的揺らぎの効果として半古典量子化則に現れる Maslov の位相がこの枠組みにおいて考察される。このとき、この枠組みでの半古典極限をとることによって、Maslov の位相が Berry の位相に類似した幾何学的な性質を持つことが明確に示される。この枠組みでの半古典極限においては、古典運動が外部パラメーターの役割をはたし、プランク定数 \hbar が断熱パラメーターの役割を演じ、Maslov の位相は Berry の位相として認識され、複素位相空間の特異点のまわりの巻き付き数として現れることが示される。この枠組みと通常の WKB 法との相違が議論された後、スクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法によるアプローチは、通常の WKB 近似を越えて量子系を古典的に記述する 1 つの可能な方法であることが指摘される。

CONTENTS

1. 序 論	2
2. スクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法	7
2.1 スクイーズされたコヒーレント状態	7
2.2 時間依存変分原理と正準変数条件	12
2.3 初期条件についての考察	15
3. 時間依存変分法による Maslov の位相	18
3.1 時間依存位相因子と作用函数	18
3.2 半古典極限と運動方程式の解	21
3.3 Berry の位相としての Maslov の位相	28
3.4 簡単な例	32
4. WKB 近似を越えて	35
5. 結 語	38
Appendices.	43
appendix A. Balian-Brezin の公式	43
appendix B. Berry の位相	44
appendix C. (1+1)-次元ソリトン模型	50
References	58
Figure captions	62

1. 序 論

量子多体系において特徴的な運動, 例えば孤立した多フェルミ粒子系としての原子核における集団運動や無限自由度の系としての場の理論におけるソリトンの力学等に興味が向けられる際に, 全ての自由度を扱うことなく, その量子系に特徴的な少数の自由度を抜き出しそのダイナミクスを記述する目的を持って, これまで多くの研究がなされてきている。また, 様々な量子多体系において, もし“粒子数”あるいは“縮退度”を表す数 N が大きい極限をとるならば, そのときその量子系は古典系として良く記述される場合があることが知られている。¹⁾ このことと同様な状況は量子色力学 (QCD) においても実現されていると考えられよう。QCD はカラー (color) 自由度の数 N_c が無限に大きい極限で, 無限個の種類のメソンを持った古典メソン理論に帰着されると考えられている。²⁾ その状況では, バリオン (baryon) はメソン場からつくられた古典ソリトンとして実現される。QCD の低エネルギー有効模型としてのスキーム (Skyrme) 模型,³⁾ あるいは一般にカイラルソリトン (chiral soliton) 模型は上に述べた状況に立脚しているとみなされよう。しかしながら我々は, 有限量子多体系としての原子核や QCD のカラー自由度の数に対して現実的な状況に興味があるので, これらの量子系を記述する上で“ $N \rightarrow \infty$ ”の極限としての古典力学からのずれは決して無視できず, 考慮されねばならないであろう。

QCD の低エネルギー有効模型としてのバリオンのソリトンモデルは, ハドロン構造, ハドロン間相互作用を統一的に記述し理解する上で興味の持たれてきたモデルである。しかしながら Skyrme モデルに見られるように, 核力で重要な中間領域での中心力としての引力が定性的にも現れず, 問題もまた内在している。そこでは 2 ソリトン系を記述するために用いられた積近似 (product ansatz) の妥当性が疑問視され, 積近似に頼らない扱いや,^{4), 5)} ソリトン間ポテンシャルに対する積近似からのずれの考察⁶⁾ 等がなされているが, まだ明確な結論が下せた段階には至っていないと考えられる。さらに興味深いのは, “ $N_c \rightarrow \infty$ ”の極限からのずれとしての量子効果の考察である。バリオンのソリトンモデルは古典ソリトンモデルの段階であったが, ソリトン間相互作用に古典ソリトンのまわりの量子的揺らぎの効果を取り入れる試みが (1+1)-次元ソリトン模型や^{7), 8)} さらに Skyrme モデル⁹⁾ に対してなされてきている。しかしながら最低次の量子的効果を評価する段階にあるので, 中間領域でのバリオン間相互作用に複雑に現れると考えられる非摂動的な量子効果を取り込み, 記述することが期待される。この観点から, 量子的揺らぎを高次の効果まで取り込んで量子系を記述する近似的扱いが, 有限量子多体系やソリトン系に適用可能な形で構成されることが望まれる。こうして古典的変数の言葉で高次の量子効果まで含んで量

子系を記述する問題に直面することになる。

これまで量子系を古典的変数で記述する試みは多くなされてきている。多フェルミ粒子系である原子核においては, 時間依存ハートレー・フォック (time-dependent Hartree-Fock (TDHF)) 理論が発展してきた。¹⁰⁾ TDHF 近似は原子核集団運動, 原子核反応を記述する有効な方法であることが知られている。¹¹⁾ また場の理論においては, 1 ループ (one-loop) の近似を越える目的を持って有効ポテンシャルの変分的な導出がガウス波束の近似の範囲内で定式化されてきている。¹²⁾ TDHF 理論の様な時間依存変分原理 (time-dependent variational principle (TDVP))¹³⁾ に基礎をおいた扱いでは, まず変分試行関数を考察している問題に従って最適に選ぶことから出発する。そのとき変分試行関数は, ある c 数変数でパラメーターづけられ, それらのパラメーターの時間発展を TDVP を通して決定することにより, 状態の時間発展が規定されるのである。例えば, TDHF 理論においては変分試行状態としては単一スレーター行列式 (single Slater determinant) をとり, Slater 行列式を特徴づける c 数変数の時間発展を TDVP により決定する。こうして量子系の時間発展を求めることは, 古典変数の時間発展を解くことに帰着されるのである。

TDHF 理論等に見られる量子系の記述については, 特徴的には 2 つの側面が存在していると考えられる。1 つは, 量子系の古典対応を得るという側面である。変分試行状態が正準変数でパラメーターづけられているならば, 時間依存変分原理により導かれる運動方程式は古典正準方程式にはかならず, もとの量子系の古典的対応物とみなされよう。これは, 適当な再度量子化の手続きを通して, 幾分その姿を変えてもとの量子系に戻るのである。2 つ目は, 時間依存シュレーディンガー方程式の近似解を構成するという側面である。変分試行状態の空間として全てのヒルベルト空間をとれば, もちろんもとの正確なシュレーディンガー方程式が時間依存変分原理により再現される。しかしながら, 通常, TDHF 理論では変分試行状態を single Slater determinant に制限するように, 近似的状態としてその時間発展を追うということがなされるのである。

これらの変分試行状態は本質的にコヒーレント状態 (coherent state) である。コヒーレント状態は量子系の様々な物理現象を研究する際に広く用いられてきている。¹⁴⁾ しかしながら, 通常のコヒーレント状態では量子的揺らぎがある意味で固定されているといえる。半古典近似あるいは WKB 近似を越えて量子系を古典的な言葉で記述することを目指した研究が遂行されるときには, 先に述べた時間依存変分法の 2 つ目の側面に照らして, 変分試行状態である近似的状態としてのコヒーレント状態の枠組みを改良する余地が残されていると言えよう。

TDHF 理論はハートレー・フォック (Hartree-Fock) の基底状態のまわりの量子的揺らぎが小さいという仮定の下で、乱雑位相近似 (random phase approximation (RPA)) の結果を示すが、RPA を越えた微視的理論を構成する目的をもって、新しい理論、例えば自己無撞着集団座標法 (SCC method),^{15)~17)} 共鳴ハートレー・フォック近似 (resonating Hartree-Fock approximation), 共鳴乱雑位相近似 (resonating random phase approximation),^{18),19)} 拡張された TDHF 理論 (extended TDHF theory)¹⁰⁾ といった微視的理論が構築されてきている。また、場の量子論においては、有効ポテンシャルを求める際のガウス波束の方法の一般化が多く実行されてきており、^{20)~23)} それらは Jackiw-Kerman による、有効作用の一般ガウス波束近似の定式化に基づいて、²⁴⁾ さらに拡張を目指した研究としてなされてきている。

これまで、我々もまた高次の量子効果を含んで量子系を古典的に記述可能にする 1 つの方法を提案してきている。^{25)~27)} その枠組みは、近似的状態としてのコヒーレント状態を改善する方向への発展の 1 つであり、スクイーズされたコヒーレント状態 (squeezed coherent state) を変分試行状態とする時間依存変分法として与えられる。そのとき TDHF 理論で発展してきた正準変数条件に注意が払われ、^{10),16)} 量子的揺らぎを含んだ形で正準形式に理論が構成されることになる。このアプローチはまた Jackiw-Kerman アプローチ²⁴⁾ の改良であり、系統的な取扱いが容易に可能となる。しかしながら、通常の WKB 法との直接の関係はこれまで明確にされていなかった。

本論文の主要な目的は、スクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法を構成し、これにより、通常の WKB 法を越えた量子系の近似的扱いが構成されることを示すことである。1 自由度ボソン系に注意が向けられるが、(1+1)-次元スカラー場のソリトンモデルも念頭に置かれている。特に本論文の目的の 1 つとして、この枠組みが 1 自由度ボソン系に適用されたとき、通常の半古典量子化則に現れる Maslov の位相、すなわち $\oint pdq = 2\pi\hbar(n + 1/2)$ 中の量子効果から起因する 1/2 の Maslov の補正部分が、Berry の位相と同じ構造をもって現れることを示すことである。同様なことは、ガウス波束近似^{28),29)} による半古典的時間発展によっても指摘されているが、³⁰⁾ 我々の変分的アプローチでは、 \hbar の高次の効果がすでに取り込まれることになっており、したがってスクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法と通常の WKB 法との考え方の相違が考察される。その上で、半古典オーダーでの Maslov の位相の Berry の位相としての幾何学的性質を明確にするために、可能な改良と拡張が実行される。ここで現れる状況は時間依存変分法の枠組みで、断熱近似に頼らずにダイナミカルな効果を含んだ拡張された Berry の

位相が導かれたとき³¹⁾ の状況に極めて類似していることが理解されるであろう。2 つ目の目的として、スクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法によるアプローチは、少なくとも量子系の基底状態エネルギーを評価する際に極めて有効であることを示すことである。スクイーズされたコヒーレント状態を用いることにより、量子的揺らぎと古典的運動とは、結合した運動方程式を通して高次の量子効果まで取り込まれた形で、自己無撞着に決まるべき量として現れることになる。このとき、TDHF 理論で発展してきた正準変数条件^{16),10)} に注意が払われる。こうして古典的運動、量子的揺らぎ共に正準方程式に定式化され、量子系の WKB オーダーを越えた近似的記述として古典的運動方程式を最適な初期条件のもとで解くことに問題が帰着され、高次の量子効果まで含まれた古典的記述が与えられることになる。こうして \hbar の高次の効果の取り込みのため、量子効果としての零点エネルギーは、結合した運動方程式を数値的に解くことにより良く再現されることが示される。このように、このアプローチは WKB 近似を越えて進む 1 つの可能な方法であることが理解されるであろう。

本論文は以下のように構成される。第 2 章では、スクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法が構成される。また、我々の方法は波動関数のガウス波束近似と異なり、第 2 量子化表示を一貫して保つため、種々の期待値を評価する際に用いられることになる Balian-Brezin の公式³²⁾ が Appendix A にまとめられる。さらに、“squeezing(絞り込み)”の自由度の導入によりもたらされる量子的揺らぎを表す古典的力学変数に対する初期条件の選択の妥当性が併せて示される。3 章では、この時間依存変分法のアプローチでの半古典極限と通常の WKB 近似との間の関係が議論される。時間依存変分原理で残される位相因子について考察した後、スクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法の枠組みでの半古典極限が定式化される。さらに、通常の WKB 近似との関係を見るために、WKB 近似の発想に合わせた考察がなされる。そのとき、Maslov の位相が Berry の位相、あるいは幾何学的位相に類似した幾何学的な性質を持って現れることが明白に示されることになる。またこのとき、ダイナミカルな効果を含んだ拡張された Berry の位相との類似から、古典運動が外部パラメーターの、 \hbar が断熱パラメーターの役割を果たすことが理解されるであろう。Berry の位相、拡張された Berry の位相については、Appendix B にまとめられる。4 章ではこの時間依存変分法によるアプローチは WKB 近似を越えていく 1 つの可能な方法であることが、具体的例を通して示される。Appendix C には、スクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法の、(1+1)-次元場の理論系としてのソリトン模型への適用がまとめられる。このとき、メソン場からソリトンが作られ、ソリトンが存在することにより作られる平均場によりメソン場の固有モードが変更を受け、このことがまたソリトンプロフィー

ルに反映するといった自己無撞着性を取り込まれ、WKB 近似を越えた扱いになっていることが示される。またこのときにもこの枠組みでの半古典極限が考察され、量子的揺らぎを表す 2 点函数から、通常現れる WKB 法の安定性方程式が再現されることが示される。最後の章は結語にあてられる。

2. スクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法

この章では、スクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法の枠組みを与える。ここでは 1 自由度ボソン系においてこの枠組みを構成するが、複数自由度をもった代数模型（例えば SU(2) 模型）³³⁾ や無限自由度をもつ場の理論系への拡張（Appendix C を見よ）²⁷⁾ も可能である。

スクイーズされたコヒーレント状態は、近年量子光学の分野で注目を集めてきたものである。³⁴⁾ この状態は座標と運動量の不確定性関係はもちろん保たれているが、一方の不確定さを犠牲にすることによりもう一方の不確定さが“絞り込まれた”量子的状態である。実験的にこの状態を実現することが可能になったことにより、光通信、微弱信号の検出器等への応用がなされ始めている。ここでは、スクイーズされたコヒーレント状態を変分試行函数とする時間依存変分法を構成し、“スクイーディング”の効果により量子効果が取り込まれた量子系の古典力学的扱いを与えることができることを示す。

2.1 スクイーズされたコヒーレント状態

時間依存変分原理により考察下の量子状態を決定する。このときすべてのヒルベルト空間に属する状態について変分すればもとのシュレーディンガー (Schrödinger) 方程式を再現するが、序論で述べたように我々は量子的揺らぎを取り込んだ量子系の可能な古典的記述に興味があるので、変分試行状態を制限して近似的扱いを構築しよう。このとき、通常用いられるコヒーレント状態近似を越えた扱いを考察するために、スクイーズされたコヒーレント状態を変分試行状態にとろう。

スクイーズされたコヒーレント状態は以下の形で与えられる。

$$|\Phi(\alpha, \beta)\rangle \equiv \exp\{\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a}\} |\Psi(\beta)\rangle, \quad (2.1a)$$

$$|\Psi(\beta)\rangle \equiv \exp\left\{\frac{1}{2}(B \hat{a}^{\dagger 2} - B^* \hat{a}^2)\right\} |0\rangle. \quad (2.1b)$$

ここで $|0\rangle$ はボソン演算子 \hat{a} に関する真空状態であり、次の関係が満足されている。

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad \text{and} \quad [\text{other combinations}] = 0, \quad (2.2a)$$

$$\hat{a} |0\rangle = 0. \quad (2.2b)$$

ここで, $[,]$ は交換子を表す。また, 状態 (2.1b) 式の $|\Psi(\beta)\rangle$ は“スクイズされた真空 (squeezed vacuum)”と呼ばれる。(2.1b) 式で $|0\rangle$ -真空に作用している指数関数の形の演算子は, ボゴリューボフ (Bogoliubov) 変換を引き起こすユニタリー演算子であり, こうして“スクイズされた真空” $|\Psi(\beta)\rangle$ は, Bogoliubov 変換された演算子 $\hat{c} \equiv \hat{a} \cosh |B| - \hat{a}^\dagger (B/|B|) \sinh |B|$ の真空 $\hat{c}|\Psi(\beta)\rangle = 0$ になっている。これは“量子的揺らぎ”の効果によりもとの真空が変更をうけていることを記述することになっており, 以下で見ていく様にこの“スクイーディング”の効果を考慮することによって, 量子的揺らぎを取り込んだ量子系の古典的記述を可能にするのである。スクイズされたコヒーレント状態は, スクイズされた真空の上に立つコヒーレント状態として, (2.1a) の形に書かれる。

いま, 状態 (2.1a), (2.1b) 式は c 数変数 α, B で特徴づけられているが, 後の便宜のために B と B^* の代わりに次の β, β^* という変数を導入しておこう。

$$\beta = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{B}{|B|} \sinh |B|, \quad B = \frac{\beta}{|\beta|} \sinh^{-1}(\sqrt{2}|\beta|). \quad (2.3)$$

さらに, 通常用いられるスクイズされたコヒーレント状態 (2.1a), (2.1b) 式は, 座標・運動量で表した別の同値な形に書き換えることが可能である。まず, 座標演算子及び運動量演算子を定義しよう。

$$\hat{Q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad \hat{P} = (-i)\sqrt{\frac{\hbar}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger). \quad (2.4)$$

このとき, Appendix A にあげた Balian-Brezin の公式を用いることにより, (2.1a), (2.1b) 式は次のガウス型の状態に変形することができる。

$$\begin{aligned} |\Phi(t)\rangle &\equiv (2G)^{-\frac{1}{4}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(p\hat{Q} - q\hat{P})\right\} \exp\left\{\frac{1}{2\hbar}\Omega\hat{Q}^2\right\} |0\rangle \\ &= e^{-i\varphi} |\Phi(\alpha, \beta)\rangle. \end{aligned} \quad (2.5)$$

ここで, 次の諸量を導入した。

$$q = \sqrt{\frac{\hbar}{2}}(\alpha + \alpha^*), \quad p = (-i)\sqrt{\frac{\hbar}{2}}(\alpha - \alpha^*), \quad (2.6)$$

$$\Omega = 1 - \frac{1}{2G} + i2\Pi, \quad (2.7a)$$

$$\begin{aligned} G &\equiv \frac{1}{2} \left| \cosh |B| + \frac{B}{|B|} \sinh |B| \right|^2 \\ &= \left| \sqrt{\frac{1}{2} + |\beta|^2} + \beta \right|^2, \end{aligned} \quad (2.7b)$$

$$\begin{aligned} \Pi &\equiv \frac{i}{2} \frac{B^* - B}{|B|} \frac{\sinh |B| \cosh |B|}{\left| \cosh |B| + \frac{B}{|B|} \sinh |B| \right|^2} \\ &= \frac{i}{2} (\beta^* - \beta) \sqrt{\frac{1}{2} + |\beta|^2} G^{-1}, \end{aligned} \quad (2.7c)$$

$$e^{-i2\varphi} \equiv \frac{1}{\sqrt{G}} \left(\sqrt{\frac{1}{2} + |\beta|^2} + \beta \right). \quad (2.8)$$

(2.5) 式第 1 行目の指数関数中, (q, p) 部分はコヒーレント状態を構成する部分そのものであり, スクイズされた真空を構成するための演算子は指数関数の肩に \hat{Q}^2 がのった演算子部分に書き直されている。その c -数係数 Ω はさらに実部と虚部にわけられ, 便宜上実部中, “1” を別にした。これは, もともとの真空 $|0\rangle$ の“波束”の広がりを表しており, スクイズされたコヒーレント状態はもとの真空の広がり “1” を消して新たな真空の広がりとして “ $1/2G - i2\Pi$ ” を持ち込んだことに対応していると言って良い。こうして, 時間に依存した変数として $\alpha, \alpha^*, \beta, \beta^*$ の代わりに q, p, G, Π を扱うことになる。上で述べたように, 変数 (G, Π) はスクイズされた真空のガウシアン分布の広がりであらわし, それに虚数部分が導入された形をもっていることがわかる。以下の議論においては, スクイズされたコヒーレント状態の同値型 (2.5) 式を出発点に採ることとする。後に理解されるが, 変数 (q, p) は大雑把に言って古典力学変数に対応し, (G, Π) は量子的揺らぎを表す古典的変数となっている。我々の枠組みではこれらの変数を力学変数として扱い, 量子効果を古典力学的な扱いで取り込むことになる。ここで, スクイズされたコヒーレント状態 (2.1a) (2.1b) 式から同値型 (2.5) に移行した際に表れた変数 G は (2.7b) 式から正の値であり決して 0 をとらないことに注意しておこう。次の章で議論するように, このことが我々の枠組みと通常の WKB 近似との間の関係を考察する際に重要となる。

先にも述べたように, 一般に, スクイズされたコヒーレント状態は不確定さを“絞り込む”という性質をもっている。通常のコヒーレント状態を $|\Phi_c\rangle$ と書くと ((2.1a), (2.1b) 式で $B = B^* = 0$ に対応), 標準偏差の自乗, すなわち座標, 運動量の不確定さは容易に計算されて,

$$(\Delta q)_c^2 \equiv \langle \Phi_c | (\hat{Q} - q)^2 | \Phi_c \rangle = \frac{1}{2}\hbar, \quad (2.9a)$$

$$(\Delta p)_c^2 \equiv \langle \Phi_c | (\hat{P} - p)^2 | \Phi_c \rangle = \frac{1}{2} \hbar \quad (2.9b)$$

となる。このとき、コヒーレント状態における不確定関係として次の関係式を得る。

$$(\Delta q)_c (\Delta p)_c = \frac{\hbar}{2}. \quad (2.10)$$

こうして通常のコヒーレント状態では任意の時刻で最小不確定が実現されていることがわかる。一方、考察下のスクイーズされたコヒーレント状態の場合には、標準偏差の自乗は“squeezing”の自由度の導入のために変更を受ける。実際、期待値を評価することにより、標準偏差の自乗は次の形に得られる。

$$(\Delta q)^2 \equiv \langle \Phi | (\hat{Q} - q)^2 | \Phi \rangle = \hbar \xi, \quad (2.11a)$$

$$(\Delta p)^2 \equiv \langle \Phi | (\hat{P} - p)^2 | \Phi \rangle = \hbar \eta, \quad (2.11b)$$

ただし、 ξ と η を次のように定義した。

$$\xi \equiv G, \quad (> 0) \quad (2.12)$$

$$\eta \equiv \frac{1}{4G} + 4G\Pi^2. \quad (> 0) \quad (2.13)$$

ξ , η はともに正の数であるが、 $1/2$ より小さくなり得る。このように、スクイーズされたコヒーレント状態は、その不確定のうち一方を“絞り込む”ことが可能であることがわかるであろう。もちろん不確定関係は満足している。すなわち、スクイーズされたコヒーレント状態に関して次の不確定関係に到達する。

$$\begin{aligned} (\Delta q)(\Delta p) &= \hbar \sqrt{\xi \eta} \\ &= \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + 4\zeta^2} \geq \frac{\hbar}{2}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

但し、

$$\zeta \equiv 2G\Pi \quad (2.15)$$

と、定義した。コヒーレント状態の場合と異なり、不確定関係 (2.14) 式には時間に依存した力学変数 G , Π が現れており、したがって一般に最小不確定は全ての時間を通しては実現されない。このため、ここで構成しているスクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法では、ある特別な時刻 t_0 でのみ最小不確定が成り立っているという要求を課すことのみ可能である。

さて、諸量のスクイーズされたコヒーレント状態についての期待値が以下では必要となるのでまず評価しておこう。我々は一貫して第2量子化表示を保っており、このときコヒーレント状態としての性質やスクイーズされた真空がボゴリューボフ変換されたボソン演算子の真空になっていることに注意すると期待値を計算するのは容易である。例えば、

$$\langle \Phi(t) | \hat{Q} | \Phi(t) \rangle = q(t), \quad \langle \Phi(t) | \hat{P} | \Phi(t) \rangle = p(t), \quad (2.16)$$

$$\langle \Phi(t) | \hat{Q}^2 | \Phi(t) \rangle = q(t)^2 + \hbar \xi, \quad (2.17a)$$

$$\langle \Phi(t) | \hat{P}^2 | \Phi(t) \rangle = p(t)^2 + \hbar \eta, \quad (2.17b)$$

$$\langle \Phi(t) | \frac{1}{2}(\hat{Q}\hat{P} + \hat{P}\hat{Q}) | \Phi(t) \rangle = q(t)p(t) + \hbar \zeta, \quad (2.17c)$$

$$\langle \Phi(t) | \partial_Z | \Phi(t) \rangle = \frac{i}{2\hbar} (q \partial_Z p - p \partial_Z q) + iG \partial_Z \Pi. \quad (2.18)$$

ここで ∂_Z は Z についての微分を表す。即ち、 $\partial_Z = \partial/\partial Z$ 。さらに一般に、このスクイーズされたコヒーレント状態による任意の演算子の期待値は、ウィグナー変換 (Wigner transform) を用いて表すことが可能である。導出は Husimi 関数を導く際の手続きと³⁵⁾ 平行になされる。結果を示すと

$$\begin{aligned} \langle \Phi(t) | \hat{O} | \Phi(t) \rangle &= \int \int_{-\infty}^{\infty} dQ dP O_W(Q, P) \rho_W(Q, P) \\ &= \exp \left\{ \frac{\hbar}{2} \xi \left(\frac{\partial}{\partial q} \right)^2 + \hbar \zeta \left(\frac{\partial^2}{\partial q \partial p} \right) + \frac{\hbar}{2} \eta \left(\frac{\partial}{\partial p} \right)^2 \right\} O_W(q, p), \end{aligned} \quad (2.19)$$

但し、

$$\hat{\rho} \equiv |\Phi(t)\rangle \langle \Phi(t)|, \quad (2.20)$$

$$\begin{aligned} \rho_W(Q, P) &\equiv \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{iPs/\hbar} \left\langle Q - \frac{s}{2} \left| \hat{\rho} \right| Q + \frac{s}{2} \right\rangle \\ &= \frac{1}{\pi\hbar} \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \xi (P - p)^2 + \frac{4}{\hbar} \zeta (P - p)(Q - q) - \frac{2}{\hbar} \eta (Q - q)^2 \right\} \end{aligned} \quad (2.21)$$

$$O_W(Q, P) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{iPs/\hbar} \left\langle Q - \frac{s}{2} \left| \hat{O} \right| Q + \frac{s}{2} \right\rangle. \quad (2.22)$$

$\hat{\rho}$ はスクイーズされたコヒーレント状態による密度演算子であり、 O_W は演算子 \hat{O} のウィグナー変換である。また状態 $|Q\rangle$ は $\hat{Q}|Q\rangle = Q|Q\rangle$ という関係を満足するものである。このように、任意の演算子に対しそのスクイーズされたコヒーレント状態期待値は (2.19) 第 2 式のように、ウィグナー変換とそれに作用する微分演算子により一般的に得られる。ウィグナー変換 O_W は q, p にのみ依存しており、微分演算により G, Π が導入される形を持っていることがわかる。(2.19)~(2.22) 式からわかるように、 $G = 1/2, \Pi = 0$ のときこれらは Husimi 表現に帰着される。³⁵⁾ このときにはスクイーズされたコヒーレント状態は通常のコヒーレント状態に戻っていることがわかる。このように、スクイージングの自由度の導入によって、いわば拡張された Husimi 表現が得られているといつて良いかも知れない。

こうして、スクイーズされたコヒーレント状態が構成され、任意の演算子の期待値が一般的に得られた。次に必要な課題は、この状態の時間発展を決めることである。次の節でこれがどのように実行されるかを見よう。

2.2 時間依存変分原理と正準変数条件

前節で変分試行状態の構成及び行列要素の導出が完了したので、次に力学変数 $q(t), p(t), G(t), \Pi(t)$ の時間発展を決定しよう。これにより、状態 $|\Phi(t)\rangle$ の時間発展が決定されることになる。我々は、時間依存変分原理を用いてこれを実現しよう。このとき、TDHF 理論で Slater 行列式を正準変数で変数づけし、もとのフェルミ粒子系の古典的対応物として古典正準形式に帰着させるための基礎となった正準変数条件を、我々の場合にも適用する。これにより、変分試行状態は正準変数によりパラメーターづけされ、得られる運動方程式は古典正準形式の形に帰着されることになる。変分試行状態は通常古典的対応形に帰着させるためのコヒーレント状態を越えて、ここでは量子的揺らぎの効果による真空状態の変化としてスクイーズされた真空を構成し、その上にコヒーレント状態を構成したスクイーズされたコヒーレント状態であるので、量子的揺動を古典的イメージとして取り込んだ量子系の可能な古典的記述が構成されることになるのである。

時間依存変分原理は次の形に書かれる。

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt \langle \Phi(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} | \Phi(t) \rangle = 0. \quad (2.23)$$

前節でも述べたように、勿論、状態 $|\Phi\rangle$ として可能なヒルベルト空間のすべての状態を考えれば (2.23) 式はシュレーディンガー方程式を与えるが、我々は変分空間としてスクイーズされたコヒー

レント状態に制限しており、この時間依存変分原理により近似的状態としての変分試行状態 $|\Phi(t)\rangle$ の時間発展を決定することになる。さらに、正準変数を抜き出し正準形式として定式化するために、TDHF 理論で発展した正準変数条件¹⁶⁾ を課す。正準変換の自由度まで考慮して、正準変数条件は次の形に表される。

$$\langle \Phi(t) | i\hbar \partial_X | \Phi(t) \rangle = Y + \partial_X s(X, Y), \quad (2.24a)$$

$$\langle \Phi(t) | i\hbar \partial_Y | \Phi(t) \rangle = \partial_Y s(X, Y). \quad (2.24b)$$

ここで、 $s(X, Y)$ は正準変換の自由度を表す X と Y の任意関数である。こうして、“時間依存変分原理 \oplus 正準変数条件”により、変分試行状態は正準変数でパラメーターづけられ、それらの正準変数の時間発展は正準運動方程式により決定されることになる。今、上記の正準変数条件の可能な解の組として

$$(X, Y) = (q, p) \quad \text{and} \quad (\hbar G, \Pi) \quad (2.25)$$

が得られる。陽に書き下すと

$$\langle \Phi(t) | i\hbar \partial_q | \Phi(t) \rangle = \frac{1}{2}p, \quad \langle \Phi(t) | i\hbar \partial_p | \Phi(t) \rangle = -\frac{1}{2}q, \quad (2.26)$$

$$\langle \Phi(t) | i\hbar \partial_{\hbar G} | \Phi(t) \rangle = 0, \quad \langle \Phi(t) | i\hbar \partial_{\Pi} | \Phi(t) \rangle = -\hbar G. \quad (2.27)$$

最初にスクイーズされたコヒーレント状態を q, p, G, Π の変数でパラメーターづけしたのは、これらの変数が正準変数になっていたからで、勿論、別のパラメーターづけをして出発しても、上記の正準変数条件を解くことにより同じ結果に到達できるのはあきらかである。また、ここでは正準変数条件として座標・運動量表示の形を用いたが、ボソン表示(複素座標表示)では正準変換の自由度を固定すれば正準変数条件は、例えば $\langle \Phi(t) | \partial_{\eta} | \Phi(t) \rangle = \eta^*/2$, $\langle \Phi(t) | \partial_{\eta^*} | \Phi(t) \rangle = -\eta/2$ とも書け、この場合には可能な解として $(\alpha, \alpha^*), (\beta, \beta^*)$ が得られる。ここに β は、TDHF 理論のときの Holstein-Primakoff ボソン表示に類似して現れる。

座標・運動量表示に戻って、こうして時間依存変分法の結果となる運動方程式は、ドットが時

間微分を表すとして

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}, \quad (2.28)$$

$$\hbar \dot{G} = \frac{\partial H}{\partial \Pi}, \quad \hbar \dot{\Pi} = -\frac{\partial H}{\partial G}, \quad (2.29)$$

となる。これは正準方程式に他ならない。ここでハミルトン関数 H は

$$H = \langle \Phi(t) | \hat{H} | \Phi(t) \rangle \quad (2.30)$$

であり、(2.19) 式によりこの期待値は容易に評価される。以上により、問題は正準形式において適当な初期条件の下で古典的運動方程式を解くことに帰着された。このように、スクイーズされたコヒーレント状態近似の範囲内で、量子系の時間発展は適当な初期条件の下での古典系の時間発展を求める問題に帰着されることになる。しかも座標・運動量の古典変数の他に以下で明らかとなるように量子的揺らぎまで取り込まれることになっているのである。

例として、ハミルトニアンが簡単な Schrödinger 型、すなわち、運動エネルギー項 (kinetic term) と運動量を含まないポテンシャル項 (potential term) から成っている場合を考えてみよう。すなわち、ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \hat{P}^2 + V(\hat{Q}). \quad (2.31)$$

このときハミルトン関数は

$$\begin{aligned} H &= \langle \Phi(t) | \hat{H} | \Phi(t) \rangle \\ &= \frac{1}{2} p^2 + V(q) + \hbar \left(\frac{1}{8G} + 2G\Pi^2 \right) + \left[\exp \left\{ \frac{\hbar}{2} G \left(\frac{\partial}{\partial q} \right)^2 \right\} - 1 \right] V(q), \end{aligned} \quad (2.32)$$

と書け、時間依存変分原理から導かれた運動方程式は

$$\begin{aligned} p &= \dot{q}, \\ \dot{p} + \exp \left\{ \frac{\hbar}{2} G \left(\frac{\partial}{\partial q} \right)^2 \right\} V^{(1)}(q) &= 0, \end{aligned} \quad (2.33)$$

$$\begin{aligned} \Pi &= \frac{\dot{G}}{4G}, \\ \dot{\Pi} + 2\Pi^2 - \frac{1}{8G^2} + \frac{1}{2} \exp \left\{ \frac{1}{2} \hbar G \left(\frac{\partial}{\partial q} \right)^2 \right\} V^{(2)}(q) &= 0, \end{aligned} \quad (2.34)$$

となる。ただし $V^{(n)}(q)$ は変数 q に関する n 階微分を表す。運動方程式 (2.33) は $\hbar \rightarrow 0$ の極限を取るにより通常の古典運動方程式に帰着することがわかる。こうして、 (q, p) は大雑把に言って古典運動を記述し、(2.29) 式で \hbar とともに現れる (G, Π) は量子的揺らぎの効果を記述すると言える。従って、変数 G, Π は量子的揺らぎの古典的イメージとみなし得る。両者はポテンシャル項 $\exp \{ (\hbar/2) G (\partial/\partial q)^2 \} V^{(1)}(q)$, $\exp \{ (\hbar/2) G (\partial/\partial q)^2 \} V^{(2)}(q)$ を通して互いに結合した方程式を構成し、自己無撞着に決定される。

ここで次の章で再度量子化を考察する際に必要となる、作用関数を評価しておこう。(2.18) 式、あるいは正準変数条件 (2.26), (2.27) 式から (2.23) 式中の作用関数は次のように表現される。

$$\begin{aligned} S &\equiv \int_{t_0}^t dt' \langle \Phi(t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - \hat{H} | \Phi(t') \rangle \\ &= \int_{t_0}^t dt' \left\{ \frac{1}{2} (p\dot{q} - \dot{p}q) - \hbar \dot{\Pi} G - H \right\} \\ &= \int_{t_0}^t dt' \left\{ p\dot{q} + \hbar \dot{\Pi} G - H \right\} + (\text{surface terms}). \end{aligned} \quad (2.35)$$

こうして時間微分の期待値の部分であるカノニカル項 (canonical term) には $p\dot{q}$ のほかに量子的揺らぎの効果も入っており、さらにエネルギー項にも \hbar の高次の効果が既に含まれた作用関数となっている。

2.3 初期条件についての考察

時間依存変分原理と正準変数条件により、量子系の時間発展を記述することが、スクイーズされたコヒーレント状態近似の範囲内で古典系の時間発展を考察することに帰着されたが、このとき時間依存変分法により得られた正準方程式を解くために、適当な初期条件を選ぶことが不可欠である。“古典運動”を記述する力学変数 $q(t)$, $p(t)$ については、考察下の物理的過程、あるいは通常の TDHF 理論と同様に再度量子化により適当な初期条件が選ばれるべきであろうが、特に、我々は新たな自由度として量子的揺らぎを表す “squeezing” の自由度を導入しているので、少なくとも

もこれらの変数に対する初期条件を与える規準を構成する必要がある。ここでは量子系における古典的運動に興味があるので、少なくとも初期時刻には変分試行状態としての“波束”は最小不確定を満足する状態であるということを要求することは自然であろう (Minimal Uncertainty)。すなわち初期状態 $|\Phi(t_0)\rangle$ は最小不確定を満足しているという規準を課そう。さらに、量子的揺らぎによるエネルギーへの寄与が古典部分のエネルギーへの寄与を凌駕することは物理的に考えにくいことから、少なくとも初期時刻には量子的揺らぎによるエネルギーへの絶対的な寄与が最小であるという規準を課すことにする (Least Quantal Effects)。

i) Minimal Uncertainty

初期時刻で最小波束、すなわち不確定関係が最小であることを要求する。すなわち (2.14) 式から

$$\begin{aligned} (\Delta q)(\Delta p)\Big|_{t=t_0} &= \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + (4G_0\Pi_0)^2} \\ &\equiv \frac{\hbar}{2}. \end{aligned}$$

先に指摘したように、 G は正の値しかとらないことから $G_0 > 0$ という事実により

$$\Pi_0 \equiv \Pi(t=t_0) = 0, \quad (2.36)$$

であることを意味する。ここで、 t_0 は初期時刻を意味する。

ii) Least Quantal Effects

考察下の系において量子的揺らぎに起因するエネルギーに対する絶対的な寄与が初期時刻では可能な限り小さい。すなわち、次のことを要求する。

$$\left| H(q_0, p_0, G_0, \Pi_0) - H_{cl}(q_0, p_0) \right| : \text{Minimal.} \quad (2.37)$$

ここで H_{cl} は \hat{H} の期待値の古典部分、すなわち \hbar を含まない部分を意味する。こうして G_0 は“古典部分”を表す力学変数 $q(t)$, $p(t)$ の初期値 q_0 , p_0 に関係づけられる。

$$G_0 \equiv G(t=t_0) = G(q_0, p_0). \quad (2.38)$$

すなわち、初期条件 G_0 は“古典位相空間”における $q(t)$, $p(t)$ の初期値の関数とみなされる。

Fig.1

図1にモース (Morse) ポテンシャルの場合に、種々の初期値を選んだときのエネルギー期待値の計算結果を示す。ハミルトニアンは (2.31) 式の形を持ち、Morse ポテンシャルは $V(\hat{Q}) = W_0(e^{-2\mu\hat{Q}} - 2e^{-\mu\hat{Q}})$ の形を持つ。ここで、パラメーターは簡単のため $W_0 = 1$, $\mu = 0.1$ と取られている。図中、 $L.Q.E.$ は、 $G(t)$ に対する初期条件が規準 (2.37) 式に基づいてとられていることを示し、 $M.U.$ は $\Pi(t)$ に対する初期条件が規準 (2.36) 式に基づいてとられていることを示している。“Exact” は、基底状態のエネルギー固有値を示す。今、量子効果の再現に興味があるので、“古典部分” $q(t)$, $p(t)$ の初期値としてはそれぞれ $q_0 = 0$, $p_0 = 0$ ととっている。図1からわかるように、 $G(t)$, $\Pi(t)$ の初期条件に対する2つの規準が満足されているときに正確なエネルギー固有値を良く再現することから、これらの量子的揺らぎの古典的イメージに対する運動方程式の初期条件を与える2つの規準が、もっともらしい選択であることを示しているといえよう。

3. 時間依存変分法による Maslov の位相

前章では、スクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法の枠組みを与えた。そのとき、変分試行状態としてのスクイーズされたコヒーレント状態が量子効果を古典的変数として取り込むには重要であることが見られた。正準変数条件を課すことにより状態は正準変数によってパラメータづけられ、時間依存変分原理によりこれらの正準変数の時間発展は記述され、量子効果を取り込んで量子系を古典的に記述する可能な枠組みが構成された。このとき“古典軌道”を表す変数 (q, p) と“量子的揺らぎ”の効果を古典的変数として記述する (G, Π) に対し運動方程式が得られ、両者は“ポテンシャル項”を通して \hbar の高次の効果を含んで互いに結合した自己無撞着方程式を構成し、こうしてこの枠組みは、 \hbar の高次の量子効果を取り込んだ扱いと言える。したがって、この扱いは本質的に WKB 近似を含み、かつそれを越えた近似的扱いになっていることが期待される。まずこの章では、前の章で与えたスクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法の枠組みにおいて、いかにして通常の WKB 近似が再現されるかを考察しよう。ここで扱っている 1 自由度ボソン量子系では、通常の WKB 近似との関係は量子化則を通して明らかにされることが示される。すなわち、通常の WKB 法では、量子的揺らぎの効果として半古典量子化則 $\oint p dq = 2\pi\hbar(n + 1/2)$ に現れる Maslov 補正 (Maslov correction) である最後の項、 $1/2$, —Maslov の位相 (Maslov phase)— が、我々の枠組みとの関係で議論される。このとき、我々の枠組みでは Maslov の位相は、全く Berry の位相と類似した構造を持って現れることが理解されるであろう。

古典ソリトン解を持つような $(1+1)$ -次元スカラー場の理論においても、前章で構成したスクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法が構成され得る。これは Appendix C にまとめられる。このときには WKB 近似との対応は直接的であり、量子的揺らぎを表す 2 点関数が満たすべき運動方程式から $\hbar \rightarrow 0$ の極限をとることにより、直接 WKB 法で現れる安定性方程式 (stability equation) を得ることができる。このことも Appendix C において示される。

3.1 時間依存位相因子と作用関数

この節では (2.23) 式の時間依存変分原理で残されるスクイーズされたコヒーレント状態の位相因子について考察しよう。

まず、(2.23) 式の時間依存変分原理は状態 $|\Phi(t)\rangle$ に時間依存の任意の位相 $\lambda(t)$ だけの不定性を残すことに注意しておこう。すなわち、変分試行状態 $|\Phi(t)\rangle$ が $|\tilde{\Phi}(t)\rangle = e^{i\lambda(t)/\hbar} |\Phi(t)\rangle$

に変換されても、時間依存変分原理から導かれる運動方程式は不変に保たれているのである。この不変性を保つ位相を固定するために、ここでは、時間依存変分原理により決められた近似状態がより正確な状態に近づくように、Schrödinger 方程式を利用することにしよう。これにより位相 $\lambda(t)$ を決定する。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\Phi}(t)\rangle = \hat{H} |\tilde{\Phi}(t)\rangle, \quad (3.1)$$

$$|\tilde{\Phi}(t)\rangle \equiv e^{i\lambda(t)/\hbar} |\Phi(t)\rangle. \quad (3.2)$$

(3.2) 式を (3.1) 式に代入して、状態 $|\Phi(t)\rangle$ と内積をとり、結果となる微分方程式を解くことにより、位相 $\lambda(t)$ として

$$\lambda(t) = \int_{t_0}^t dt' \langle \Phi(t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - \hat{H} | \Phi(t') \rangle, \quad (3.3)$$

を得る。この位相因子は (2.35) 式の作用関数に他ならないことに注意しよう。こうして、時間依存変分原理の枠内で状態ベクトルに作用関数が指数関数の肩に乗って含まれることがわかる。この位相因子はスクイーズされたコヒーレント状態についての時間発展核 (time-evolution kernel) を考察するうえでは極めて重要なのである。すなわち、ハミルトニアンが (2.31) 式の形を持ち、かつポテンシャル項が座標演算子の 2 次以下の場合には、この時間依存の位相因子を考慮することにより time-evolution kernel は正確な表式を再現するのである。今、スクイーズされたコヒーレント状態から座標について対角化された状態は、

$$|q_i\rangle = \frac{(2\pi\hbar G_i)^{1/4}}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp_i e^{-(i/2\hbar)p_i q_i} |\Phi_i\rangle \quad (3.4)$$

と構成されるが、このとき上記の位相因子 $\lambda(t)$ を正しく考慮することによって、2 次以下のポテンシャルの場合に time-evolution kernel は

$$\langle q_f | e^{-(i/\hbar)\hat{H}t} | q_i \rangle = \left[\frac{i}{2\pi\hbar} \frac{\partial^2 S(q_f, q_i)}{\partial q_f \partial q_i} \right]^{1/2} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S(q_f, q_i) \right\} \quad (3.5)$$

と計算されるのである。²⁶⁾ ここで $S(q_f, q_i)$ は古典作用関数 $S(q_f, q_i) = \int_{t_i}^{t_f} dt' [\dot{q}(t')^2/2 - V(q(t'))]$ $_{q(t_f)=q_f, q(t_i)=q_i}$ である。このときにはスクイーズされた部分の変数 $(G(t), \Pi(t))$ は

time-evolution kernel の前因子 (pre-factor) $[(i/2\pi\hbar) \cdot \partial^2 S(q_f, q_i)/\partial q_f \partial q_i]^{1/2}$ を出すための働きをしているのである。この time-evolution kernel の表式は経路積分で求めた表式と完全に一致しており、経路積分での導出の際には古典軌道のまわりに量子的揺らぎを展開し、その揺らぎについてのガウス積分から pre-factor が現れるのであった。従って、2 次以下のポテンシャルの場合には、変数 (G, Π) はまさに量子的揺らぎの効果を担っていることがわかり、また正しい time-evolution kernel を再現するために、時間依存位相因子 $\lambda(t)$ を考慮することの重要性が認識されるであろう。この限られたハミルトニアンの場合には、こうしてスクイーズされたコヒーレント状態により時間推進のユニタリー演算子の期待値を評価することにより time-evolution kernel が導かれるので、このあとは通常の経路積分等で行われているのと同様に、time-evolution kernel のトレースのエネルギーについてのフーリエ変換をとり、その極を探すことによってエネルギーが得られる。このとき半古典量子化則が得られることになる。^{36)~39)} しかしながら我々の枠組みで、現在のところ正確な time-evolution kernel が導かれたのはこの限られた形を持ったハミルトニアンの場合だけであり、一般のハミルトニアンを持つ量子系についての WKB 法、半古典量子化則との関係は明らかではない。このことから現在の段階では、一般的には経路積分と我々の枠組みとの直接の関係がまだ見いだされていないと言えよう。本論文では、経路積分による WKB 近似との直接の関係を見る代わりに、TDHF 理論で再度量子化するときの方法を我々の枠組みに適用する。これにより、一般のハミルトニアンに対して我々の枠組みでの半古典極限を考えることによって、スクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法の枠組みでの半古典論の考察を進めていく。

この節を終わるにあたり、次のことを指摘しておこう。時間依存変分方程式に影響を与えないが、諸量、特に time-evolution kernel を評価する際に重要であった時間依存の位相因子 $\lambda(t)$ を評価するときに、ここでは Schrödinger 方程式を用いた。この導出は、ゆっくりと時間とともに変化する外部パラメーターを持ったハミルトニアンによって支配される系で Berry の位相が導かれる場合の状況と類似している。Berry の位相を導出する際にもまた位相因子は時間依存の Schrödinger 方程式を用いて決められる。(Appendix B.1 を見よ。) また、ここでは Schrödinger 方程式の助けをかりて残された位相因子を固定したが、時間依存変分原理の枠内だけでもこの位相因子は導出される。ここでは試行関数のノルムを変える変分、すなわち状態ベクトルに平行な変分を考慮せず、つねにノルムは 1 とした空間で変分していたが、ノルムを変える変分まで考慮することにより、同じ位相因子が自然に導かれることを最後に指摘しておく。

3.2 半古典極限と運動方程式の解

この節ではスクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法の枠組みの中での半古典極限を定式化し、量子的揺動を表す変数についての運動方程式の解を構成する。

一般の演算子に対するスクイーズされたコヒーレント状態期待値の表式 (2.19) から、一般のハミルトニアンに対してエネルギー期待値を評価することができる。すなわち

$$\begin{aligned} H &\equiv \langle \Phi(t) | \hat{H} | \Phi(t) \rangle \\ &= \exp \left\{ \frac{\hbar}{2} G \left(\frac{\partial}{\partial q} \right)^2 + \hbar 2G\Pi \left(\frac{\partial^2}{\partial q \partial p} \right) + \frac{\hbar}{2} \left(\frac{1}{4G} + 4G\Pi^2 \right) \left(\frac{\partial}{\partial p} \right)^2 \right\} H_W(q, p), \end{aligned} \quad (3.6)$$

と書ける。ここで $H_W(q, p)$ は、ハミルトニアン演算子 \hat{H} のウィグナー変換である。すなわち、

$$H_W(q, p) = \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{ips/\hbar} \left\langle q - \frac{s}{2} \left| \hat{H} \right| q + \frac{s}{2} \right\rangle. \quad (3.7)$$

前章でも指摘したように、ウィグナー変換 H_W は q, p のみの関数である。スクイーズされたコヒーレント状態期待値には、ウィグナー変換 H_W に作用する指数関数の肩に乗った微分演算子とともに \hbar は現れて、指数関数の展開からわかるように \hbar の高次の効果が直接期待値に取り込まれる形を持っている。このとき量子的揺らぎを表す変数 G, Π のダイナミクスに依ってこの \hbar の取り込まれかたが支配され、これにより最適な量子効果の取り込みが実現されることになるのである。このように、期待値に対する \hbar の寄与は指数関数の肩に乗って取り込まれることから、微分演算子 \hat{D} を定義して \hbar を孤立させておくことは、後の議論を進める上で便利である。したがって、次の微分演算子 \hat{D} を定義しておこう。

$$\hat{D} \equiv \frac{1}{2} G \left(\frac{\partial}{\partial q} \right)^2 + 2G\Pi \left(\frac{\partial^2}{\partial q \partial p} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{4G} + 4G\Pi^2 \right) \left(\frac{\partial}{\partial p} \right)^2. \quad (3.8)$$

こうして古典ハミルトニアン (3.6) 式は $H = e^{\hbar \hat{D}} H_W(q, p)$ と簡単に書けることになる。ここで微分演算子 \hat{D} は、 G, Π のみの関数であることに注意しておこう。したがって、時間依存変分原理により導かれた (2.28), (2.29) 式の運動方程式は次のように書ける。

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = e^{\hbar \hat{D}} \frac{\partial H_W}{\partial p},$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -e^{\hbar\hat{D}} \frac{\partial H_W}{\partial q}, \quad (3.9)$$

$$\begin{aligned} \dot{G} &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial \Pi} \\ &= e^{\hbar\hat{D}} \left\{ 2G \left(\frac{\partial^2}{\partial q \partial p} \right) + 4G\Pi \left(\frac{\partial}{\partial p} \right)^2 \right\} H_W, \\ \dot{\Pi} &= -\frac{1}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial G} \\ &= -e^{\hbar\hat{D}} \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial q} \right)^2 + 2\Pi \left(\frac{\partial^2}{\partial q \partial p} \right) + \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{4G^2} + 4\Pi^2 \right) \left(\frac{\partial}{\partial p} \right)^2 \right\} H_W. \end{aligned} \quad (3.10)$$

こうして運動方程式中に陽に \hbar を引き出すこととなった。これらの運動方程式を解くためには、前の章で述べたように初期条件を固定する必要がある。我々の枠組みで新しく導入された量子的揺らぎの古典的イメージである力学変数 $G(t)$, $\Pi(t)$ についての初期条件は、(2.36)~(2.38) の議論に従って選ばれるべきである。次の節で述べられ、通常の WKB 近似との対応を見る上で重要になるが、ここでは“古典部分” $q(t)$, $p(t)$ に関しては、TDHF 理論と同様に初期条件が選ばれる、すなわち TDHF 理論の再度量子化の手続きに従うということだけ述べておこう。こうして初期値に添え字 0 をつけて表すと、

$$q(t=t_0) \equiv q_0, \quad p(t=t_0) \equiv p_0, \quad (3.11)$$

$$G(t=t_0) \equiv G_0 = G(q_0, p_0), \quad \Pi(t=t_0) \equiv \Pi_0 = 0, \quad (3.12)$$

であり、こうして

$$q(t) = q(q_0, p_0, t), \quad p(t) = p(q_0, p_0, t), \quad (3.13)$$

$$G(t) = G(q_0, p_0, t), \quad \Pi(t) = \Pi(q_0, p_0, t), \quad (3.14)$$

となる。

さて、運動方程式に \hbar が陽に現れたが、前章でも述べたように運動方程式 (3.9) 式で $\hbar \rightarrow 0$ の極限をとると、これは通常の古典方程式に帰着することが見て取れるであろう。このとき (3.10) 式は古典軌道のまわりの量子的揺らぎの効果を記述することが期待される。こうしてスクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法の枠組みでは、時間依存変分原理から導かれた運動

方程式 (3.9), (3.10) 式段階で $\hbar \rightarrow 0$ の極限をとることが半古典極限に対応すると期待される。この手続きを我々の意味での半古典極限と定式化しよう。したがってここからは、通常の WKB 近似との関係を見ていく為に運動方程式 (3.9), (3.10) において $\hbar \rightarrow 0$ の極限をとって考察していく。運動方程式等から理解されるように、力学変数 G , Π は常に \hbar とともに現れる本質的に \hbar の次数を示す量であるので、この扱いは \hbar の 1 次までの近似に対応している。また、変数 (q, p) は通常の古典軌道を記述することになる。この次数までの近似で、変分方程式 (3.9), (3.10) は次の形に帰着される。

$$\begin{aligned} \dot{q} &= \frac{\partial H_W}{\partial p}, \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H_W}{\partial q}, \end{aligned} \quad (3.15)$$

$$\begin{aligned} \dot{G} &= 2G \frac{\partial^2 H_W}{\partial q \partial p} + 4G\Pi \frac{\partial^2 H_W}{\partial p^2}, \\ \dot{\Pi} &= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 H_W}{\partial q^2} - 2\Pi \frac{\partial^2 H_W}{\partial q \partial p} - \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{4G^2} + 4\Pi^2 \right) \frac{\partial^2 H_W}{\partial p^2}. \end{aligned} \quad (3.16)$$

これにより運動方程式に現れるハミルトニアン H_W の期待値としてはウィグナー変換 H_W の 2 階微分までとなる。次にこの半古典極限のもとで、量子的揺らぎを表す変数 G , Π について運動方程式を解くことを考えよう。これらの初期条件は 2 章で述べたように、または (3.12) 式から古典軌道 (q, p) の初期値 (q_0, p_0) の関数として与えられる。従って、運動方程式 (3.16) 式中、 H_W の 2 階微分を古典軌道により表すことができればこの方程式を解くことが可能になるであろう。この目的を持って、まずウィグナー変換 H_W の 2 階微分を古典軌道 (q, p) の言葉で表すことを考えよう。今、 \dot{q} , \dot{p} の初期条件 q_0, p_0 への依存性は、運動方程式を用いて評価することが出来る。すなわち

$$\frac{\partial \dot{q}}{\partial q_0} = \frac{\partial^2 H_W}{\partial q \partial p} \frac{\partial q}{\partial q_0} + \frac{\partial^2 H_W}{\partial p^2} \frac{\partial p}{\partial q_0}, \quad (3.17a)$$

$$\frac{\partial \dot{q}}{\partial p_0} = \frac{\partial^2 H_W}{\partial q \partial p} \frac{\partial q}{\partial p_0} + \frac{\partial^2 H_W}{\partial p^2} \frac{\partial p}{\partial p_0}, \quad (3.17b)$$

$$\frac{\partial \dot{p}}{\partial q_0} = -\frac{\partial^2 H_W}{\partial p \partial q} \frac{\partial p}{\partial q_0} - \frac{\partial^2 H_W}{\partial q^2} \frac{\partial q}{\partial q_0}, \quad (3.17c)$$

$$\frac{\partial \dot{p}}{\partial p_0} = -\frac{\partial^2 H_W}{\partial p \partial q} \frac{\partial p}{\partial p_0} - \frac{\partial^2 H_W}{\partial q^2} \frac{\partial q}{\partial p_0}. \quad (3.17d)$$

こうして右辺には評価したい H_W の 2 階微分が現れた。後の便宜のために次の行列を導入してお

こう。

$$\mathbf{M} \equiv \begin{pmatrix} \frac{\partial q}{\partial q_0} & \frac{\partial q}{\partial p_0} \\ \frac{\partial p}{\partial q_0} & \frac{\partial p}{\partial p_0} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} A_{qq_0} & B_{qp_0} \\ C_{pq_0} & D_{pp_0} \end{pmatrix}, \quad (3.18)$$

$$\mathbf{H}^{(2)} \equiv \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 H_W}{\partial q^2} & \frac{\partial^2 H_W}{\partial p \partial q} \\ \frac{\partial^2 H_W}{\partial q \partial p} & \frac{\partial^2 H_W}{\partial p^2} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} H_{qq}^W & H_{pq}^W \\ H_{qp}^W & H_{pp}^W \end{pmatrix}, \quad (3.19)$$

$$\mathbf{J} \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = -\mathbf{J}^{-1}. \quad (3.20)$$

ここで、行列 \mathbf{M} はしばしば安定性行列 (stability matrix) と呼ばれる。これは一般には初期値 (q_0, p_0) を少しずらしたときの周期軌道の安定性を調べる際に用いられる行列である。行列 \mathbf{J} は位相空間のシンプレクティック構造 (symplectic structure) のため現れていると考えられる。これらの行列 (3.18)~(3.20) の表示を用いると (3.17a)~(3.17d) 式は簡単に次の形にまとまる。

$$\dot{\mathbf{M}} = \mathbf{J} \mathbf{H}^{(2)} \mathbf{M}. \quad (3.21)$$

初期値 (q_0, p_0) から時刻 t での値 $(q(t), p(t))$ への時間発展は作用関数自身を正準変換の母関数とする正準変換に他ならないことに注意すると、 $(q(t), p(t))$ に対しての初期値に関するポアソン括弧 (Poisson bracket) は 1 であることがわかる。すなわち

$$\{q(t), p(t)\} \equiv \frac{\partial q}{\partial q_0} \frac{\partial p}{\partial p_0} - \frac{\partial q}{\partial p_0} \frac{\partial p}{\partial q_0} = 1. \quad (3.22)$$

これは (3.18) 式の定義から

$$A_{qq_0} D_{pp_0} - B_{qp_0} C_{pq_0} = 1 \quad (3.23)$$

の関係があることがわかる。もちろん、 $\det \mathbf{M}$ を t に関して微分して、(3.17) 式と初期条件を考慮することにより、(3.23) 式を直接導くことができる。こうして行列 \mathbf{M} の逆行列は陽に書き下すことができる。

$$\begin{aligned} \mathbf{M}^{-1} &= \begin{pmatrix} D_{pp_0} & -B_{qp_0} \\ -C_{pq_0} & A_{qq_0} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{\partial p}{\partial p_0} & -\frac{\partial q}{\partial p_0} \\ -\frac{\partial p}{\partial q_0} & \frac{\partial q}{\partial q_0} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.24)$$

したがって H_W の q, p に関する 2 階微分は、 (q, p) とそれらの時間微分 (\dot{q}, \dot{p}) により表すこ

とができる。(混乱が生じない限り、 A, B, C, D についている添え字は省略される。)

$$\begin{aligned} \mathbf{H}^{(2)} &= \mathbf{J}^{-1} \dot{\mathbf{M}} \mathbf{M}^{-1} \\ &= \begin{pmatrix} C\dot{D} - \dot{C}D & B\dot{C} - A\dot{D} \\ A\dot{D} - \dot{A}C & A\dot{B} - \dot{A}B \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

陽に書き下すと

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 H_W}{\partial q^2} & \frac{\partial^2 H_W}{\partial p \partial q} \\ \frac{\partial^2 H_W}{\partial q \partial p} & \frac{\partial^2 H_W}{\partial p^2} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \frac{\partial p}{\partial q_0} \frac{\partial \dot{p}}{\partial p_0} - \frac{\partial \dot{p}}{\partial q_0} \frac{\partial p}{\partial p_0} & \frac{\partial q}{\partial p_0} \frac{\partial \dot{p}}{\partial q_0} - \frac{\partial \dot{p}}{\partial p_0} \frac{\partial q}{\partial q_0} \\ \frac{\partial \dot{q}}{\partial q_0} \frac{\partial p}{\partial p_0} - \frac{\partial \dot{q}}{\partial p_0} \frac{\partial p}{\partial q_0} & \frac{\partial q}{\partial q_0} \frac{\partial \dot{q}}{\partial p_0} - \frac{\partial \dot{q}}{\partial q_0} \frac{\partial q}{\partial p_0} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \{p(t), \dot{p}(t)\} & \{\dot{p}(t), q(t)\} \\ \{\dot{q}(t), p(t)\} & \{q(t), \dot{q}(t)\} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.26)$$

こうしてウィグナー変換 H_W の 2 階微分は、望んだ様に古典軌道 (q, p) 及びそれらの時間微分の初期値依存性がわかれば得られる形に書け、いわば古典軌道の言葉で表すことができた。量子的揺らぎを表す $G(t)$, $\Pi(t)$ についての運動方程式 (3.16) は、こうして次のように書かれる。

$$\dot{G} = 2G(\dot{A}D - \dot{B}C) + 4G\Pi(A\dot{B} - \dot{A}B), \quad (3.27a)$$

$$\begin{aligned} \dot{\Pi} &= -\frac{1}{2}(C\dot{D} - \dot{C}D) - 2\Pi(\dot{A}D - \dot{A}C) \\ &\quad - \frac{1}{2}\left(-\frac{1}{4G^2} + 4\Pi^2\right)(A\dot{B} - \dot{A}B). \end{aligned} \quad (3.27b)$$

こうして量子的揺らぎを表す変数 G , Π についての運動方程式を解くことが可能となった。初期条件 (2.36), (2.37) あるいは (2.38) の下で上の運動方程式の解を見つけよう。結果のみを示すと

$$G = \frac{1}{2} \left[2G_0 A_{qq_0}^2 + \frac{B_{qp_0}^2}{2G_0} \right], \quad (3.28a)$$

$$\Pi = \frac{1}{4G} \left[2G_0 A_{qq_0} C_{pq_0} + \frac{B_{qp_0} D_{pp_0}}{2G_0} \right], \quad (3.28b)$$

が得られる。これらの G , Π を運動方程式に代入することによってこれらが解であることをチェックすることは容易である。ここで A, B, C, D は (3.18) 式で定義されているものである。

また、 $A(t = t_0) = D(t = t_0) = 1$ かつ $B(t = t_0) = C(t = t_0) = 0$ であることから、これらの解は初期条件も満足していることがわかる。こうして、古典軌道 $(q(t), p(t))$ の初期値 (q_0, p_0) に対する依存性が知られば、量子的揺らぎの古典的イメージ $G(t)$, $\Pi(t)$ を計算することが可能である。我々の半古典近似の極限では古典軌道 $(q(t), p(t))$ に対する運動方程式は (G, Π) との結合がとれるので、古典軌道 $(q(t), p(t))$ は (G, Π) に独立に決定される。しかし、 $(G(t), \Pi(t))$ は、古典軌道が決まるとそれに依存して決まる構造を持っている。このことは、次の節で TDHF 再度量子化の処方に依拠する際に、我々の枠組みでの半古典近似に特徴的な構造を与えることになる。

運動方程式から我々の枠組みでの半古典極限を定式化し、結果となる量子的揺らぎを表す変数についての運動方程式を一般的に解くことが可能となった。次に、エネルギー期待値、作用函数に他ならなかった時間依存位相因子 $\lambda(t)$ について考察しよう。いま、半古典近似の次数、すなわち \hbar の 1 次まで考察しているので、ハミルトニアン の期待値もまた \hbar の 1 次まで考慮することが必要である。(3.6) 式から、近似的エネルギー期待値として次の表式を得ることができる。

$$H = H_{\text{cl}}(q, p) + \hbar H_{\text{ql}}(q, p, G, \Pi) \quad (3.29)$$

ただし

$$H_{\text{cl}} = H_W(q, p), \quad (3.30a)$$

$$H_{\text{ql}} \simeq \frac{1}{2} G \frac{\partial^2 H_W}{\partial q^2} + 2G\Pi \frac{\partial^2 H_W}{\partial q \partial p} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{4G} + 4G\Pi^2 \right) \frac{\partial^2 H_W}{\partial p^2}. \quad (3.30b)$$

$G(t)$, $\Pi(t)$ についての解 (3.28a), (3.28b) 式、および (3.30b) 式中の H_W の 2 階微分に (3.25) 式を用いると、量子的揺らぎによるエネルギー期待値への寄与 H_{ql} に対して次の結果が得られる。

$$H_{\text{ql}} = \frac{1}{2} \left[2G_0 \dot{A}C + \frac{\dot{B}D}{2G_0} \right] - \frac{1}{4} \frac{\partial}{\partial t} \left[2G_0 AC + \frac{BD}{2G_0} \right]. \quad (3.31)$$

通常の WKB 法では、再度量子化の手続きにおいて作用函数が重要な役割を果たす。TDHF 再度量子化の意味では、これは状態の一価性を課すことにより指数函数の肩に乗っている時間依存位相因子 $\lambda(t)$ 中、エネルギーの部分を除いた位相に量子化則が課されることに対応する。この $\lambda(t)$ は作用函数にはかならなかったもので、我々の半古典極限のセンスで、これを評価しておこう。エネ

ルギーの部分は (3.31) 式等から容易に得られるので、 $\langle \Phi(t) | i\hbar \partial / \partial t | \Phi(t) \rangle$ を見ておこう。この部分の中の半古典的な寄与、すなわち \hbar の 1 次の部分 $\hbar \Pi \dot{G}$ ((2.35) 式を見よ) は (3.28) 式を用いて次のように表される。

$$\begin{aligned} \Pi \dot{G} &= \frac{1}{4G} \left(2G_0 AC + \frac{BD}{2G_0} \right) \left(2G_0 A \dot{A} + \frac{B \dot{B}}{2G_0} \right) \\ &= \frac{\dot{A}B - A\dot{B}}{4G} + \frac{1}{2} \left(2G_0 \dot{A}C + \frac{\dot{B}D}{2G_0} \right). \end{aligned} \quad (3.32)$$

したがって、指数函数の肩に乗る作用函数は 2 つの部分に分けて陽に書くと

$$\begin{aligned} \int dt \langle \Phi(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \Phi(t) \rangle &= \int dt [p\dot{q} + \hbar \Pi \dot{G}] \quad (+\text{surface terms}) \\ &\simeq \int dt \left\{ p\dot{q} \right. \\ &\quad \left. + \hbar \left[\frac{\dot{A}B - A\dot{B}}{4G} + \frac{1}{2} \left(2G_0 \dot{A}C + \frac{\dot{B}D}{2G_0} \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.33a)$$

$$\begin{aligned} \int dt \langle \Phi(t) | \hat{H} | \Phi(t) \rangle &= \int dt [H_{\text{cl}} + \hbar H_{\text{ql}}] \\ &\simeq \int dt H_W \\ &\quad + \hbar \int dt \left\{ \frac{1}{2} \left(2G_0 \dot{A}C + \frac{\dot{B}D}{2G_0} \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{4} \frac{\partial}{\partial t} \left(2G_0 AC + \frac{BD}{2G_0} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (3.33b)$$

となる。

次の節で、スクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法の枠組みでの半古典極限が、TDHF 再度量子化に依拠した手続きを通して、WKB 近似との関係を持つことが議論される。こうして両者の対応、相違が明らかとなるであろう。

3.3 BERRY の位相としての MASLOV の位相

前節において、スクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法の枠組みの中での半古典極限の考え方を与えた。そのとき、量子的揺らぎを表す変数 $G(t)$, $\Pi(t)$ についての運動方程式は解け、その解は古典軌道により表されることがわかった。すなわち、古典運動に伴われて、自動的に量子的揺らぎの古典的イメージ ($G(t)$, $\Pi(t)$) はその位相空間で運動を与えるのである。この節では TDHF 再度量子化の手続きに依拠して我々の枠組みでの半古典極限での再度量子化を見る。このとき量子的揺らぎの効果がどのような構造を持って現れるかを調べる。

これ以降束縛状態の問題を扱うことにしよう。したがって古典軌道 ($q(t)$, $p(t)$) は周期的と仮定し、その周期を T_{cl} と書くことにする。(3.28a), (3.28b) 式から、 $G(t)$, $\Pi(t)$ はまた周期的であることがわかる。しかしながら、その周期は一般に古典軌道の周期と同じであるとは限らない。通常の WKB 法の考え方では、エネルギーは古典エネルギーの表式に保たれており、そこに \hbar は含まれていない。一方前節でも見られたように、我々の枠組みではエネルギーとしてのハミルトニアン期待値に既に \hbar の効果まで取り込まれていた。したがって、我々の時間依存変分法と通常の WKB 法との比較を行い、両者の関係を見ていくためには、再度量子化する際に、作用函数のうちどの部分までをエネルギーの位相と見てどの部分に量子化条件を課すかに注意を払わなければならない。こうして、我々の時間依存変分法の枠組みでの半古典極限の表式から通常の WKB 近似の考え方に移行させるためには、我々のスクイーズされたコヒーレント状態でのハミルトニアン期待値としてのエネルギーの内、(3.33b) 式の量子的揺らぎに起因する部分 $\hbar \int dt H_{ql}$ は、再度量子化するときの位相因子 $\int dt \langle \Phi(t) | i\hbar \partial/\partial t | \Phi(t) \rangle$ に吸収させる必要が生じる。すなわち我々の枠組みの発想を離れて WKB 法との対応を見るためには、(3.1)~(3.3) 式でスクイーズされたコヒーレント状態の位相因子が固定されたときに現れた作用函数は、次のように (3.33a), (3.33b) 式から古典部分のエネルギーのみ陽に残して書き直されるべきである。

$$\begin{aligned} S &\equiv \int_0^{T_{cl}} dt \langle \Phi(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} | \Phi(t) \rangle \\ &= \int_0^{T_{cl}} dt \left\{ \left[p\dot{q} + \hbar \frac{\dot{A}B - A\dot{B}}{4G} \right] - H_{cl} \right\} \quad (+\text{total time-derivative term}). \end{aligned} \quad (3.34)$$

今、我々のアプローチの発想を離れたので、ここではエネルギーは \hbar を含まない“古典部分” H_{cl} であるとみなされている。この上で、TDHF 理論における再度量子化の手続きに従おう。^{40), 41)}

これは状態 (波動函数) に 1 価性を課すことに対応する。このとき 3-1 節で述べたように時間依存位相因子 $\lambda(t)$ が指数函数の肩に乗っており、これは作用函数にはかならなかったもので、通常の量子化則と同様、作用函数としての位相のうち、ダイナミカル (エネルギー) 位相を除いた部分に量子化条件が課せられる。こうして“エネルギー”の部分を除いた“変更された作用積分”が $2\pi\hbar$ の整数倍におかれる。

$$\int_0^{T_{cl}} dt \left\{ p\dot{q} + \hbar \frac{\dot{A}B - A\dot{B}}{4G} \right\} = 2\pi\hbar n, \quad n : \text{integer} \quad (3.35)$$

上の関係式は次のように書き直すことができる。

$$\oint_C p dq = 2\pi\hbar \left(n - \frac{\Gamma}{2\pi} \right), \quad (3.36)$$

ただし

$$\begin{aligned} \Gamma &\equiv \int_0^{T_{cl}} dt \frac{\dot{A}B - A\dot{B}}{4G} \\ &= \int_0^{T_{cl}} dt \frac{\dot{A}B - A\dot{B}}{2(2G_0 A^2 + \frac{B^2}{2G_0})}, \end{aligned} \quad (3.37)$$

と定義された。ここで C は古典軌道に沿った積分路を示す。これが我々の枠組みでの半古典極限から WKB 近似の考え方に移行した際の半古典量子化則の表式である。すなわちエネルギー位相のうち量子的揺らぎに起因する部分を再度量子化されるべき位相部分に繰り込んだ結果である。

我々の変分法の発想から WKB 法の発想に移行した際に量子化則に自然に現れることになった位相因子 Γ について考察を進めよう。この位相因子 Γ は実は Berry の位相と全く同じ構造を持った幾何学的側面を持っているのである。このことは以下のようにして理解されよう。前の章において指摘したように、(3.37) 式中の分母 G は決して 0 をとらず、常に正の値である。もともと (2.7b) 式の形を持っていたことと運動方程式の解とから、 G を次のように、ある複素量の絶対値の自乗であらわすことは自然である。

$$\begin{aligned} G &= \frac{1}{2} \left(2G_0 A^2 + \frac{B^2}{2G_0} \right) \\ &\equiv \frac{1}{2} |z|^2, \end{aligned} \quad (3.38)$$

ただし、複素変数 z は次のように定義される。

$$z \equiv \sqrt{2G_0}A + i\frac{B}{\sqrt{2G_0}}. \quad (3.39)$$

G が決して 0 をとらないという事実から、複素変数 z もまた決して 0 をとることはない。こうして古典軌道の周期的な時間発展の間、複素位相空間の原点 $z = 0$ を通ることはないことが保証される。このとき (3.37) 式はさらに次の形に書き換えられる。

$$\begin{aligned} \Gamma &= \frac{1}{2} \int_0^{T_d} dt \operatorname{Im} \left\{ -\frac{\partial}{\partial t} \ln \left(\sqrt{2G_0}A + i\frac{B}{\sqrt{2G_0}} \right) \right\} \\ &= -\frac{1}{2} \operatorname{Im} \oint_C \frac{dz}{z} \\ &= -\pi\nu. \end{aligned} \quad \nu : \text{integer} \quad (3.40)$$

ここに G あるいは z は変数 A, B を通して古典運動 $q(t)$ に伴われた時間発展を行う。整数 ν は、古典運動に伴われて複素位相空間の“特異点 (singular point)”である原点 $z = 0$ の回りを何回まわったかの巻き付き数 (winding number) に他ならない。こうして幾何学的性質が明確に現れていることがわかる。(3.36), (3.40) 式から

$$\oint_C pdq = 2\pi\hbar \left(n + \frac{\nu}{2} \right), \quad n, \nu : \text{integer} \quad (3.41)$$

が得られる。ここに ν は、WKB 近似の観点からは、量子的揺らぎに起因して半古典量子化則に現れるいわゆる“Maslov の補正”に他ならず、位相 Γ を“Maslov の位相”と呼ぶ。(3.41) 式から通常の WKB 近似での半古典量子化則が再現されていることがわかる。このとき、我々の枠組みでの半古典極限をとった上で、量子的揺らぎに起因したエネルギー位相が量子化されるべき位相に繰り込まれ、もともと量子化されるべき位相にあった (G, Π) の効果と合わさって正しく再現されていることを再び強調しておく。

“Maslov の位相” Γ が上記のような幾何学的構造を持つことが理解されたが、この幾何学的な状況はさらに Berry の位相 (Berry's phase), ^{42), 43)} あるいはカノニカル位相 (canonical phase) ⁴⁴⁾ において出会った状況に類似していることが理解される。我々は時間依存変分法の枠組みで、Appendix B に簡単に示したように Berry の位相を導いた。³¹⁾ そのときには、断熱

近似に頼ること無く、ダイナミカルな補正を含んだ拡張された Berry の位相を導くことに成功している。さらに、その拡張された Berry の位相において断熱極限をとることにより通常の Berry の位相が再現され、その幾何学的な性質が明白な形で回復することを示した。いまのスクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法に基づく半古典的扱いでは、位相 Γ が Berry の位相に対応し、古典運動 $q(t)$ が外部パラメーターの役割を演じているのである。すなわち、古典運動 $q(t)$ が閉じた軌道を描くと“Maslov の位相”を支配する量子的揺らぎを表す $G(t)$ がその古典運動に伴われて軌道を描く。これは、“Berry の位相”の場合に、ハミルトニアン中の外部パラメーターがパラメーター空間の閉じた経路を描くとき、あるいは外部パラメーターを系の“遅い”自由度を表す力学変数としたときに古典軌道が閉じた軌道を描くとき、消去され見ない自由度になる“速い”自由度から Berry の位相が現れることに対応している。“遅い”自由度が古典運動 (q, p) に対応し“速い”自由度が (G, Π) に対応しているのである。(もちろんここでは“遅い”, “速い”は象徴的に用いている。) また、“Maslov の位相” Γ 中、“winding number” ν の前の係数 π は、複素位相空間 (z, z^*) の“特異点” $z = 0$ から見込まれた軌道が囲む立体角のちょうど半分になっており、このことも Berry の位相で出会ったときの状況と同じである。こうして我々の枠組みでの半古典極限から WKB 法の発想に移行したときには、WKB 半古典量子化則に現れる量子的揺らぎに起因した“Maslov の位相”は古典運動に対する量子化則に“Berry の位相”として加わるべき補正として認識される。また、もし我々の枠組みで半古典極限をとらずに同じことを実行するとしよう。このときには Γ はもともと \hbar の高次の項を含んでいるはずのものである。そこで半古典極限をとることにより、考察してきたようにこの位相 Γ は明白に幾何学的側面を示すことになっているのである。このことも我々が以前、時間依存変分法の枠組みで Berry の位相を考察したときの状況と全く同じである。(Appendix B.3 を見よ。) そのときには“断熱近似”に頼らない拡張された Berry の位相が導出されており、そのとき“断熱極限”, すなわち“遅い”自由度に特徴的な振動数を 0 にする極限をとることにより、通常の Berry の位相がその幾何学的構造を明白にして再現されたのである。この“断熱極限”は今のスクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法の場合には“半古典極限” $\hbar \rightarrow 0$ に対応していることは、以上の考察から明らかであろう。したがって、 \hbar が“断熱パラメーター”の役割を演じていることが理解される。もし我々の枠組みで \hbar の高次まで取り込むならば、この幾何学的な側面は明瞭さを失うかも知れない。

3.4 簡単な例

この節では、前節までで展開してきた枠組みがどの様に実行されるかを、調和振動子の例を用いて見てみる。次の調和振動子ハミルトニアンを考える。

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hat{P}^2 + \frac{1}{2}\omega^2\hat{Q}^2. \quad (3.42)$$

この時ハミルトニアンの Wigner 変換と、それを用いて、スクイーズされたコヒーレント状態によるハミルトニアンの期待値は (3.6) 式によって容易に計算され、

$$H = H_W(q, p) + \hbar \left\{ \frac{G}{2}\omega^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{4G} + 4G\Pi^2 \right) \right\}, \quad (3.43)$$

$$H_W(q, p) \equiv H_{cl} = \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2}\omega^2 q^2,$$

となる。ここで、この調和振動子の例ではハミルトニアンの期待値は、すでに \hbar の 1 次までであることに注意しよう。すなわち、半古典極限をとるまでもなく半古典的次數でとどまっているので、以下の考察は時間依存変分法の枠内では正確である。時間依存変分方程式から古典運動方程式は次のようになる。

$$\dot{q} = \frac{\partial H_W}{\partial p} = p, \quad (3.44a)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H_W}{\partial q} = -\omega^2 q. \quad (3.44b)$$

$q(t)$, $p(t)$ の初期値をそれぞれ q_0 , p_0 とすると、これらの運動方程式の解は容易に得られて

$$q = q_0 \cos \omega t + \frac{p_0}{\omega} \sin \omega t, \quad (3.45a)$$

$$p = -q_0 \omega \sin \omega t + p_0 \cos \omega t, \quad (3.45b)$$

となる。こうして量子的揺らぎの古典的イメージ G , Π を評価するとき必要であった安定性行列 (stability matrix) (3.18) 式の行列要素は簡単に計算できて

$$A_{qq_0} \equiv \frac{\partial q}{\partial q_0} = \cos \omega t, \quad (3.46a)$$

$$B_{qp_0} \equiv \frac{\partial q}{\partial p_0} = \frac{1}{\omega} \sin \omega t, \quad (3.46b)$$

$$C_{pq_0} \equiv \frac{\partial p}{\partial q_0} = -\omega \sin \omega t, \quad (3.46c)$$

$$D_{pp_0} \equiv \frac{\partial p}{\partial p_0} = \cos \omega t, \quad (3.46d)$$

となることがわかる。次に必要なのは、力学変数 $G(t)$ に対する初期条件である。これは (2.37) 式の “Least Quantal Effects” の規準により決定される。

$$\left| \frac{G_0}{2}\omega^2 + \frac{1}{8G_0} \right| : \text{Minimal}, \quad (3.47)$$

すなわち

$$G_0 = \frac{1}{2\omega}, \quad (3.48)$$

と与えられる。こうして (3.28a), (3.28b) 式から量子的揺らぎの古典的イメージ $G(t)$, $\Pi(t)$ を評価することができる。結果は

$$G = \frac{1}{2\omega}, \quad \Pi = 0. \quad (3.49)$$

(3.37) 式から “幾何学的位相” Γ を計算することは容易である。すなわち

$$\begin{aligned} \Gamma &= \int_0^{T_{cl}} dt \frac{\dot{A}B - A\dot{B}}{4G} \\ &= \frac{\omega}{2} \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} dt (-\sin^2 \omega t - \cos^2 \omega t) \\ &= -\pi. \end{aligned} \quad (3.50)$$

こうして、“巻き付き数” ν が決定される。

$$\nu = 1. \quad (3.51)$$

したがって、時間依存変分原理に基づく我々の方法においても、通常の WKB 半古典量子化則が

その幾何学的側面を明確にしながら再現されることが具体的例によっても示された。すなわち

$$\oint pdq = 2\pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (3.52)$$

しかしながら、この扱いでは系のエネルギーは上記の量子化則の下で古典ハミルトニアン $H_{cl}(=H_W)$ のみで表現されなければならないことに注意しておこう。この点で我々の枠組みと WKB 法との相違点があるのである。

通常の WKB 法の考え方と、スクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法の発想との相違を認識しておくことは重要である。我々のスクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法では、系のエネルギーはハミルトニアン演算子の期待値 $E = \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle$ 自身に保たれており、すでに \hbar の高次の項まで含んでいる。他方、通常の WKB 法では系のエネルギーは古典ハミルトン関数 $E = H_{cl}$ の形であり、量子効果は半古典量子化則を通してのみ考慮される。したがって、両者の固有の比較を行うためには、我々の枠組みで半古典極限をとったうえで量子的揺らぎに起因したエネルギー期待値の部分は再度量子化されるべき位相因子に繰り込む必要性があったのである。

次の章において、通常の WKB 近似を越えて量子効果を取り込む目的を持って、スクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法の考え方が展開される。

4. WKB 近似を越えて

—Squeezed Coherent State Approach の発想—

前の章において、スクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法の枠組みと通常の WKB 近似との間の関係が示された。しかしながら、エネルギーの評価に関して我々の枠組みと通常の WKB 法との間に考え方の相違が存在していた。通常の WKB 法では、系のエネルギーは \hbar を含まない古典エネルギーの形に保たれており、量子効果は半古典量子化則に現れる量子的揺らぎに起因した Maslov の補正を通してのみ取り込まれる。一方、スクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法の枠組みにおいては、ハミルトニアン演算子のスクイーズされたコヒーレント状態期待値自身が系のエネルギーそのものであり、こうして状態の“squeezing”の効果により、エネルギー期待値にはすでに \hbar の高次の効果が含まれている。したがって、両者のかかわり合いを調べるためには、前章で行ったようにエネルギー期待値の一部を位相因子に繰り込むといった手続きが必要になったのである。しかしながら、一貫して我々のスクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法の枠組みで系を扱う際には、前の章で行ったような、エネルギー期待値の一部を位相因子に繰り込んでそれはエネルギーとはみなさないといった手続きは不要になる。こうしてこの枠組みでは系のエネルギーは (3.6) 式自身で与えられる。

前の章と同様に、上記の考え方を調和振動子を例にとって示そう。この簡単な場合には、運動方程式 (3.9), (3.10) は互いに結合しないので (3.49) 式の G , Π はこの枠組み内で正確な解であり、また (3.33a), (3.33b) 式も近似の無い正確な結果である。こうして位相因子 (3.33a) およびエネルギー (3.33b) とともに容易に計算できる。(3.33a) 式の位相因子中の第 2 項は、前章 (3.40) 式に示されたように幾何学的位相に他ならない。第 3 項は量子的揺らぎの古典的イメージ $G(t)$, $\Pi(t)$ のダイナミクスから生じる項である。式 (3.46a)~(3.46d) から、このダイナミクスに依る位相因子を陽に計算することができる。結果は

$$\Gamma_d \equiv \int_0^{T_d} dt \frac{1}{2} \left(2G_0 \dot{A}C + \frac{\dot{B}D}{2G_0} \right) = \pi, \quad (4.1)$$

となる。この位相因子は (3.50) 式の幾何学的位相因子 Γ を正確に打ち消すように働いていることがわかる。こうして (3.33a) は次の形に帰着する。

$$\int_0^{T_d} dt \langle \Phi(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \Phi(t) \rangle = \oint_C pdq. \quad (4.2)$$

もし、この枠組みで再度量子化を実行しようとするならば、前章と異なり系のエネルギーはスクイーズされたコヒーレント状態期待値そのものであるのでエネルギー位相を量子化されるべき位相に繰り入れる必要はなく、したがって (3.41) 式は

$$\oint_C pdq = 2\pi\hbar n \quad n : \text{integer} \quad (4.3)$$

と変更される。こうして $q(t)$, $p(t)$ に対する初期条件はこの関係式 (4.3) に支配される。例えば量子効果のあらわれに興味があるときには、 $q(t)$, $p(t)$ の初期値は基底状態に対応して $q_0 = p_0 = 0$ にとっておけば十分であろう。エネルギー期待値の量子的揺らぎに起因する部分 (3.31) 式は容易に計算され、結果は

$$H_{\text{ql}} = \frac{\omega}{2}, \quad (4.4)$$

と得られる。こうして系の全エネルギー (3.29) は

$$H = \frac{1}{2}p_0^2 + \frac{1}{2}\omega^2 q_0^2 + \frac{\hbar\omega}{2} \quad (4.5)$$

と、得られる。(4.3) 式における再度量子化の手続きにしたがうと、系のエネルギー (4.5) は $H = \hbar\omega(n + 1/2)$ と表現される。これは正確な結果である。

上記の簡単なモデルから期待されるように、一般に、スクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法の枠組みで、系の近似的なエネルギーを得るための手続きは以下のようにまとめられる。最初に、初期条件 (2.36), (2.37) の下で自己無撞着な運動方程式 (3.9)~(3.10) あるいは (2.33)~(2.34) を解析的あるいは数值的に解く。次に WKB 近似を越えて \hbar の高次まで取り込まれた、スクイーズされたコヒーレント状態によるエネルギー期待値を計算する。いま量子効果に興味があるので q , p の初期値として、調和振動子ハミルトニアンの時と同様、基底状態に対応した $q_0 = p_0 = 0$ をとれば十分であろう。この手続きが実際に良く系の基底状態のエネルギーを与えることは、数値計算により確かめられる。

例として、エッカート (Eckart) ポテンシャル $V(\hat{Q}) = -U_0/\cosh^2 \alpha \hat{Q}$ の場合の $G(t)$ - $\Pi(t)$ の運動を図 2 に示す。ここでパラメーターは簡単のため $U_0 = 1$, $\alpha = 0.1$ にとった。また古典軌道の初期条件は $q_0 = p_0 = 0$ にとられている。こうして、得られたエネルギーは基底状態のエネルギーと比較すべきものである。図 2 から $G(t)$ - $\Pi(t)$ の位相空間において、閉じた軌

道が描かれることがわかる。こうしてこの枠組みでは、量子的揺らぎの効果は、初期条件 (2.36), (2.37) の下での $G(t)$ - $\Pi(t)$ による運動により、自動的に取り込まれることが理解されるであろう。スクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法のアプローチは、この様に“量子的揺らぎ”を表す古典的変数のダイナミクスにより量子効果が自動的に取り込まれる枠組みなのである。

Fig.2

図 3 に、このようにして数值的に計算されたエネルギー期待値と正確な基底状態エネルギー固有値、通常の WKB 近似による値との比較がなされている。スクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法において計算されたエネルギー期待値の時間依存性の有無をチェックするために、横軸に時間がとられている。時間依存運動方程式を数值的に解いた結果から得られるエネルギー期待値に時間依存性は見られず、数值的誤差の範囲内で正しくエネルギーは保存されていることがわかり、計算は妥当である。それぞれのエネルギーの比較から、スクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法による扱いは、 \hbar の高次の項の取り込みのためかなり良い結果を与えることがわかる。

Fig.3

こうして、ここで展開してきたスクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法による量子系の扱いは、WKB 近似を越えた高次の量子効果を取り込んで量子系を古典的に記述する可能な枠組みであると言えるだろう。

5. 結 語

本論文において、まずスクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法の枠組みが構成された。変分試行状態としてスクイーズされたコヒーレント状態を考える。このとき時間依存ハートレー・フォック理論で展開されてきた正準変数条件に注意を払い、この条件を課す。これによりある意味で古典運動を記述する変数と量子的揺らぎを記述する変数のそれぞれが古典的正準変数として記述され、これらの時間発展は時間依存変分原理から導かれる正準運動方程式を解くことによって決定される枠組みとなった。このときあらたに導入された量子的揺らぎを表す力学変数 $G(t)$, $\Pi(t)$ に関する初期条件の選び方に対して2つの規準を示し、系のエネルギーを評価することによってこれらの妥当性が併せて示された。

次にこのアプローチが1自由度ボソン系に適用された。このとき、通常用いられてきた半古典近似での最低次の量子的揺らぎの効果から生じる Maslov の位相が、断熱近似の下での Berry の位相に類似した幾何学的位相として明白に解釈されることが示された。すなわち、閉じた軌道を構成する古典運動がちょうど外部パラメーターの役割をはたし、断熱性を支配する断熱パラメーターの役割を \hbar が担っていることが明白に認識された。半古典量子化則に現れる Maslov の位相が Berry の位相の例であるという指摘はまた Littlejohn によりなされ、³⁰⁾ 関連する研究が彼と彼の共同研究者たちによって半古典近似の枠内で展開されている。^{45)~47)} しかしながら、本論文における時間依存変分法による扱いは、WKB 近似よりも高次の \hbar の寄与が考慮されている。こうして、WKB 法と対応させるためにはこの枠組みでの半古典極限を考察する必要があった。この枠組みでは運動方程式段階で $\hbar \rightarrow 0$ の極限をとることが WKB 近似に対応しており、このときエネルギーはハミルトニアン³⁰⁾の期待値で \hbar のオーダーまで考慮に入れることとして考えられた。しかしながら、この時間依存変分法の枠組みと通常の WKB 法との発想は異なっている。通常の WKB 法では、考察している系のエネルギーは \hbar を含まない古典形に保たれており、量子効果は再度量子化の際の半古典量子化則の Maslov 補正の部分からのみ取り込まれる。これに対し、本論文で展開したスクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法では、ハミルトニアン演算子のスクイーズされたコヒーレント状態による期待値 $\langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle$ がすでに \hbar の高次までに依存しており、適当な初期条件の下で運動方程式を解くことにより、WKB 近似を越えた次数まで量子効果を取り込んだエネルギーが得られることになる。したがって両者のアプローチを比較するためには、時間依存変分法の枠組みでの半古典極限をとって、かつ量子効果によるエネルギーを再度量子化されるべき位相因子に繰り込む必要があった。この手続きを通して、Maslov の位相が正し

く再現され、かつその幾何学的構造、特に Berry の位相としての性格が明白に示されたのである。

このようにして束縛状態の問題に対してスクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法での半古典極限がとられたときに、再度量子化されるべき位相因子は自動的に2つの異なる部分から構成されることになった。1つは、ボーア・ゾンマーフェルト (Bohr-Sommerfeld) の位相 $\oint_C pdq$ であり、もう1つが Maslov の位相に対応するものとなった。後者は複素位相空間の特異点となる原点の回りを軌道が何回まわるかを示す“巻き付き数 (winding number)”として理解され、幾何学的側面が明白な形で表された。また、これは幾何学的位相、あるいは Berry の位相としての性格を明確に示したのは先に述べたとおりである。この時間依存変分法のアプローチでは、通常の半古典論のような転回点に関する複雑さを回避することが可能となっている。例えば、波動関数の接続公式を導く際のストークス・ライン (Stokes lines) についての考察や、⁴⁸⁾ 量子的揺らぎについて2次まで考慮したときの経路積分法での焦点 (caustics) についての考察⁴⁹⁾ などが回避されている。こうして Maslov の位相を得るための主要な手続きは“巻き付き数”を数えることに帰着された。スクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法により見られた Maslov の位相の幾何学的側面は、量子的揺らぎを表す変数 $G(t)$ に対して規準をたてて課した初期条件には依っていない。したがって、本論文では1自由度ボソン系の場合の扱いが示されたが、量子的揺らぎの初期条件についての問題を避けて Maslov の位相の考察を行って良いことが期待されるので、多自由度系への一般化は直接実行されるであろう。

本論文においてはさらに、WKB 近似のオーダーを越えた量子系の古典的記述が可能となっていることが示された。スクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法の考え方の中では、 \hbar の高次の効果まで変分的な意味で含まれていることになっていた。したがって、“古典運動”と“量子的揺らぎ”の結合した自己無撞着方程式を数値的に解き、またハミルトニアン³⁰⁾のスクイーズされたコヒーレント状態期待値として \hbar の高次の効果まで含んでいるエネルギーを評価することにより、少なくとも基底状態のエネルギーは良く再現されることが示された。この事実により、時間依存変分法によるこのアプローチが、WKB 近似を越えて高次の量子効果まで取り込んだ上で、量子系を古典的に記述する可能な1つの方法であることを示しているといえよう。

コヒーレント状態経路積分 (coherent state path integral) との関係は、現在のところ残念ながらまだ明確になっているとは言えない段階である。通常のコヒーレント状態経路積分では、もともとの変数を古典部分とそのまわりの揺らぎの部分とに、はじめから2つの部分にわけてしまう。本論文で展開した方法では“古典”部分と“量子的揺らぎ”の部分を最初からわけることはなく

理論を構成し、それらは変分方程式を通して自己無撞着に決定されるべきものであり、こうして \hbar の高次の効果まで自然に取り込むことを可能にしているのである。通常の経路積分との関係は、3.1節に述べたように、ポテンシャルが座標の2次以下の場合には示されている。一般のポテンシャルの場合や、コヒーレント状態経路積分との直接の関係を見ることは興味の持たれる課題である。

再度量子化則の幾何学的側面については、バーグマン (Bargmann) 表示や一般化されたコヒーレント状態表示での半古典論等が展開されている。そこでは半古典量子化則は Bargmann あるいは一般化されたコヒーレント状態表示での複素位相空間の解析性に帰せられている。^{50), 51)} さらに興味深いのは、時間に依存しない Schrödinger 方程式を直接扱ったときに、Maslov の位相が Berry の位相として現れることの指摘である。⁵²⁾ これは空間座標についての2階微分を、波動関数を2成分化することにより2成分の1階微分方程式に書き直すことから出発する。こうして空間座標を“時間”と読み換えることにより、 2×2 非エルミートハミルトニアンのスピン系の“時間依存 Schrödinger 方程式”の形に帰着させてしまう。このときに、 2×2 ハミルトニアンの固有値の“準位交差”によって生じる Berry の位相が、ちょうど Maslov の位相になるのである。その際の“準位交差”の特異点は、ちょうどポテンシャルの転回点となっていることが見られる。我々の方法との直接の対応は現在のところ完全には明らかになっていないが、このように Maslov の位相の Berry の位相としての性格について、現在興味が持たれ研究が進展している状況にある。⁵³⁾

最近、我々のスクイーズされたコヒーレント状態を用いたアプローチが、半古典近似の観点からは良い近似になっていることが示された。さらに我々の時間依存変分方程式で $\hbar \rightarrow 0$ をとった半古典極限での (G, Π) に対する運動方程式は、古典軌道 (q_{cl}, p_{cl}) のまわりの変数の展開 $(q_{cl} + q_{ql}, p_{cl} + p_{ql})$ による、 (q_{ql}, p_{ql}) に対する線型化された方程式に帰着されることが、変数の取り替えにより直接示された。⁵⁴⁾ これは、我々のアプローチと WKB 法との関係を示す別の道筋を表しており、今後の研究に興味もたれる。さらに“量子カオス (quantum chaology)”の分野の最近の急速な発展はまた、半古典論に対する新しい興味を引きつけ、量子-古典対応についての新しい見方を生む可能性を秘めていると言えよう。⁵⁵⁾ そこではまた、我々のスクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法のアプローチが、量子効果の取り込みの観点からも興味もたれると期待される。

多くの自由度を持ったより一般的な系に対するスクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法の拡張は、大きな興味もたれるところである。³³⁾ また Appendix C に示した

様に、 $(1+1)$ 次元ソリトンモデルにおいてもスクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法が構成された。これにより、従来なされていなかったソリトン-ソリトン散乱等での高次の量子効果を含んだ記述が可能であると期待されるので、これらの物理過程での量子効果の発現を調べるのが今後の課題として残されている。さらに、スクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法の発展としては、thermo field dynamics の考え方を少し援用して、量子的揺らぎと同時に温度による揺らぎを取り込むことである。⁵⁶⁾ これは実際に可能であり、現在研究が進展している。こうして有限温度の量子系において量子的揺らぎと温度による揺らぎの競合の時間発展を追いかけるといった、興味の持たれる物理現象を記述する可能性が開かれるであろう。

量子的揺らぎを含んだ量子系の古典的記述に対するスクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法の試みは、今後ますます多くの発展が期待される。

謝 辞

本研究は藤原義和博士との共同研究に端を発するものであり、本研究の遂行に際し、終始助言を与えて下さった藤原義和博士に感謝の意を表したいと思います。また堀内和助教授、福井隆裕博士には多くの議論をして頂き、数々の助言を与えて下さったことに、感謝したいと思います。藤井宏次氏には多くの貴重なコメントを頂いた。ここに感謝の意を記したいと思います。山村正俊教授には日頃からの励まし、助言を頂いたことに感謝したいと思います。最後になりましたが、玉垣良三教授をはじめとする京都大学原子核理論研究室の方々に日常から議論をして頂いたことに感謝致します。

APPENDIX A. Balian-Brezin の公式

この Appendix では、(2.1) 式のスクイーズされたコヒーレント状態と (2.5) 式の同値性を示す際や、期待値の計算の際に鍵となる Balian-Brezin の公式³²⁾ をまとめておく。

任意のボソンの生成消滅演算子 $\{a_i, a_i^\dagger\}$ ($i = 1, 2, \dots, N$) に対し、次の記号を導入し、併せて $2N$ 次元 c 数ベクトル $\boldsymbol{\lambda}$ および $2N \times 2N$ c 数行列 τ を導入しておこう。

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\gamma} &= \{a_1, a_2, \dots, a_N, a_1^\dagger, a_2^\dagger, \dots, a_N^\dagger\} = \{\mathbf{a}, \mathbf{a}^\dagger\} , \\ \boldsymbol{\lambda} &= \{\boldsymbol{\ell}_1, \boldsymbol{\ell}_2\} , \\ \tau &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} .\end{aligned}\tag{A1}$$

ボソン系に対する一般化されたボゴリューボフ (Bogoliubov) 変換 T は、結果となる準粒子演算子 $\boldsymbol{\alpha} \equiv T^{-1} \boldsymbol{\gamma} T$ がまたボソン演算子になるという条件の下で、 $\boldsymbol{\gamma}$ の 1 次および 2 次の形により生成される。Balian-Brezin によって示された一般化されたボゴリューボフ変換の正準分解は次のように与えられる。³²⁾

$$T = e^{\boldsymbol{\lambda} \tau \boldsymbol{\gamma}} e^{\frac{1}{2} \boldsymbol{\gamma} S \boldsymbol{\gamma}} = e^{\frac{1}{2} \mathbf{a}^\dagger X \mathbf{a}^\dagger + \mathbf{k} \mathbf{a}^\dagger} e^{\mathbf{a}^\dagger Y \mathbf{a} + \frac{1}{2} \text{Tr} Y + \nu} e^{\frac{1}{2} \mathbf{a} Z \mathbf{a} + \mathbf{k}' \mathbf{a}} ,\tag{A2a}$$

ここで $S = {}^t S$ は $2N \times 2N$ 対称行列である。 ${}^t S$ は行列 S の転置行列を意味する。 $N \times N$ 行列 X, Y, Z , および N 次元ベクトル \mathbf{k}, \mathbf{k}' および ν は次の T の定義

$$T \equiv e^{\tau S} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} ,\tag{A2b}$$

のもとで

$$\begin{aligned}X &= T_{12}(T_{22})^{-1} , \quad Z = -(T_{22})^{-1} T_{21} , \quad e^{-Y} = {}^t T_{22} , \\ \mathbf{k} &= \boldsymbol{\ell}_1 - X \boldsymbol{\ell}_2 , \quad \mathbf{k}' = -(T_{22})^{-1} \boldsymbol{\ell}_2 , \\ \nu &= \frac{1}{2} (\boldsymbol{\ell}_2 X \boldsymbol{\ell}_2 - \boldsymbol{\ell}_1 \boldsymbol{\ell}_2) ,\end{aligned}\tag{A2c}$$

によって与えられる。ただし ${}^t T_{22}$ は $N \times N$ 行列 T_{22} の転置を意味する。

APPENDIX B. Berry の位相

この Appendix では Berry の位相 (Berry phase) についてまとめておく。B.1 において通常の断熱近似での Berry の位相の導出を述べる。⁴²⁾ B.2 では 2 準位模型で具体的に Berry の位相を導く。B.3 では我々が行った時間依存変分法を用いた Berry の位相の構成を述べる。³¹⁾ このときには非断熱効果を含んだ“拡張された Berry の位相”が得られ、“断熱極限”で通常の Berry の位相が再現されることを、B.2 で用いるモデルを用いて具体的にみる。

B.1 断熱近似による Berry の位相

Berry の位相の導出については経路積分による方法⁵⁷⁾ 等もあるが、この節では Berry 自身による Berry の位相の導出⁴²⁾ を述べる。また、結合チャンネル系に WKB 法を適用することにより Yabana-Horiuchi のもうひとつの位相 (extra phase) と共に Berry の位相も導出されることが示されており、⁵⁸⁾ さらに Yabana-Horiuchi の位相自身に関する研究の進展も最近為され始めており^{59), 60)} 興味深いが、ここでは立ち入らないことにする。

外部パラメーター $\mathbf{R}(t) = (X, Y, \dots)$ に依存したハミルトニアンを考えよう。 $\mathbf{R}(t)$ はゆっくり変化するものとして、パラメーター空間での閉じた経路 $\mathbf{R}(0) = \mathbf{R}(T)$ を考え、それを \mathcal{C} で表すことにする。系の状態 $|\Psi(t)\rangle$ は Schrödinger 方程式に従って時間発展する。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H}(\mathbf{R}(t)) |\Psi(t)\rangle. \quad (\text{B1})$$

外部パラメーター $\mathbf{R}(t)$ は断熱的にゆっくりとしか変化しないので、各時刻毎に基底として

$$\hat{H}(\mathbf{R}(t)) |n(\mathbf{R}(t))\rangle = E_n(\mathbf{R}(t)) |n(\mathbf{R}(t))\rangle, \quad (\text{B2})$$

を満たす $|n(\mathbf{R}(t))\rangle$ をとる。断熱的に外部パラメーターは変化するので、断熱定理により $|n(\mathbf{R}(0))\rangle$ から出発した状態は、時間発展の後 $|n(\mathbf{R}(t))\rangle$ にとどまるであろう。従って状態は次のように書くことができる。

$$|\Psi(t)\rangle = \exp(i\gamma_n(t)) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_n(\mathbf{R}(t'))\right\} |n(\mathbf{R}(t))\rangle. \quad (\text{B3})$$

(B3) 式を (B1) 式に代入すると、 γ の満たす方程式として

$$\dot{\gamma}_n(t) = i\langle n(\mathbf{R}(t)) | \dot{n}(\mathbf{R}(t)) \rangle, \quad (\text{B4})$$

を得る。ここにドットは時間微分を表す。結局、パラメーター空間での周期 T 時間経過したとき、すなわちサイクル \mathcal{C} での状態変化は

$$|\Psi(T)\rangle = \exp(i\gamma_n(\mathcal{C})) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt E_n(\mathbf{R}(t))\right\} |n(\mathbf{R}(0))\rangle, \quad (\text{B5})$$

と記述される。ここで、ダイナミカル (エネルギー) 位相の他に現れた位相 $\gamma_n(\mathcal{C})$ は、Berry の位相、あるいは幾何学的位相と呼ばれるものであり

$$\gamma_n(\mathcal{C}) = i \oint_{\mathcal{C}} \langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle \cdot d\mathbf{R}, \quad (\text{B6})$$

となる。簡単のためパラメーター空間を 3 次元とすると、ストークス (Stokes) の定理から

$$\begin{aligned} \gamma_n(\mathcal{C}) &= -\text{Im} \int_{\mathcal{C}} d\mathbf{S} \cdot \nabla \times \langle n | \nabla n \rangle \\ &= -\text{Im} \int_{\mathcal{C}} d\mathbf{S} \cdot \sum_{m \neq n} \langle \nabla n | m \rangle \times \langle m | \nabla n \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B7})$$

ここで $\nabla \langle n | n \rangle = \langle \nabla n | n \rangle + \langle n | \nabla n \rangle = 0$ (ただし $\nabla \equiv \nabla_{\mathbf{R}}$) を用いた。さらに

$$\langle m | \nabla n \rangle = \frac{\langle m | \nabla \hat{H} | n \rangle}{E_n - E_m}, \quad m \neq n \quad (\text{B8})$$

を用いるとまた

$$\gamma_n(\mathcal{C}) = \int_{\mathcal{C}} d\mathbf{S} \cdot \mathbf{V}_n(\mathbf{R}), \quad (\text{B9})$$

$$\mathbf{V}_n(\mathbf{R}) \equiv \text{Im} \sum_{m \neq n} \frac{\langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} \hat{H} | m(\mathbf{R}) \rangle \times \langle m(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} \hat{H} | n(\mathbf{R}) \rangle}{(E_m(\mathbf{R}) - E_n(\mathbf{R}))^2} \quad (\text{B10})$$

と表すこともできる。

B.2 2 準位模型による具体例

今、例として次のハミルトニアンを考えよう。

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hbar\omega(\hat{b}^\dagger\hat{b} + \frac{1}{2}) + \begin{pmatrix} \epsilon & v\hat{b} \\ v\hat{b}^\dagger & -\epsilon \end{pmatrix} \\ &\equiv \hbar\omega(\hat{b}^\dagger\hat{b} + \frac{1}{2}) + 2\epsilon\hat{S}_0 + v\hat{b}\hat{S}_+ + v\hat{b}^\dagger\hat{S}_-.\end{aligned}\quad (\text{B11})$$

ここで $\hat{S}_0, \hat{S}_+, \hat{S}_-$ は $\text{SU}(2)$ 代数の交換関係を満たす生成子であり、ここではスピン $1/2$ 表現のみが考察されている。さらに、この節ではハミルトニアンの 2×2 “スピン” 部分にのみ注目して、ボソン演算子 \hat{b} は c 数 g とみなす。このとき “遅い” 外部パラメーターは vg^*, vg, ϵ であり、これらを

$$\epsilon = \mu \cos \alpha, \quad vg = \mu \sin \alpha e^{-i\beta}, \quad vg^* = \mu \sin \alpha e^{i\beta}, \quad (\text{B12})$$

と変換しておく。こうすることにより、スピン部分のハミルトニアンは

$$\mu \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha e^{-i\beta} \\ \sin \alpha e^{i\beta} & -\cos \alpha \end{pmatrix} \quad (\text{B13})$$

となり、各時刻での固有状態は

$$\begin{aligned}\xi_+ &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} e^{-i\beta} \\ \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} & \text{for } \mu, \\ \xi_- &= \begin{pmatrix} -\sin \frac{\alpha}{2} e^{-i\beta} \\ \cos \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} & \text{for } -\mu,\end{aligned}\quad (\text{B14})$$

と得られる。今、 “外部パラメーター” は $\mathbf{R} = (\epsilon, \alpha, \beta)$ であるので、

$$\begin{aligned}\nabla_\epsilon \xi_- &= 0, \\ \nabla_\alpha \xi_- &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \cos \frac{\alpha}{2} e^{-i\beta} \\ -\frac{1}{2} \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix}, \\ \nabla_\beta \xi_- &= \begin{pmatrix} i \sin \frac{\alpha}{2} e^{-i\beta} \\ 0 \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (\text{B15})$$

従って、(B6) 式から、固有値 $-\mu$ に対する状態の Berry の位相は、容易に

$$\begin{aligned}\gamma_-(\mathcal{C}) &= \pi(1 - \cos \alpha) \\ &= \pi(1 - \frac{\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + v^2 g^2}}),\end{aligned}\quad (\text{B16})$$

と得られる。これは、パラメーター空間 (ϵ, vg, vg^*) での閉曲線 \mathcal{C} が、準位交差の特異点 $(\epsilon, vg, vg^*) = (0, 0, 0)$ から見て囲む立体角の半分であり、断熱近似が成り立つ限り Berry の位相はパラメーター空間の経路 \mathcal{C} にしか依らない幾何学的位相であることがわかる。

B.3 時間依存変分法による “拡張された Berry の位相”

以下では、我々によって実行された時間依存変分法に基づいた取扱いをのべる。³¹⁾ モデルハミルトニアンとして、(B11) 式を考えよう。このとき前節と違って、ボソン演算子を初めから “外部パラメーター” として c -数には置かず、一般化されたコヒーレント状態を用いた古典近似を考える。変分試行関数として

$$|\phi\rangle = e^{g\hat{b}^\dagger - g^*\hat{b}} e^{f\hat{S}_+ - f^*\hat{S}_-} |0, -1/2\rangle, \quad (\text{B17})$$

ととる。ただし、 $|0, -1/2\rangle = |0\rangle_b \otimes |-1/2\rangle_s$ であり、 $\hat{b}|0\rangle_b = 0$, $\hat{S}_-|-1/2\rangle_s = 0$ である。複素変数 g と f のかわりに、次の正準変数をとるのが便利である。

$$g = \sqrt{I_B} e^{-i\theta_B}, \quad \frac{f}{|f|} \sin |f| = \sqrt{I_F} e^{-i\theta_F}. \quad (\text{B18})$$

このとき、ハミルトニアン (B11) の期待値は、これらの変数を用いて

$$\mathcal{H} = \hbar\omega(I_B + \frac{1}{2}) - \epsilon(1 - 2I_F) + 2v\sqrt{I_F(1 - I_F)}\sqrt{I_B} \cos(\theta_B - \theta_F), \quad (\text{B19})$$

と書ける。従って、時間依存変分原理から導かれる運動方程式は

$$\begin{aligned}\hbar \frac{d\theta_B}{dt} &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial I_B} = \hbar\omega + v\sqrt{I_F(1 - I_F)}\sqrt{\frac{1}{I_B}} \cos(\theta_B - \theta_F), \\ \hbar \frac{dI_B}{dt} &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \theta_B} = 2v\sqrt{I_F(1 - I_F)}\sqrt{I_B} \sin(\theta_B - \theta_F),\end{aligned}\quad (\text{B20})$$

$$\begin{aligned}\hbar \frac{d\theta_F}{dt} &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial I_F} = 2\epsilon + v \frac{1 - 2I_F}{\sqrt{I_F(1 - I_F)}} \sqrt{I_B} \cos(\theta_B - \theta_F), \\ \hbar \frac{dI_F}{dt} &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \theta_F} = -2v \sqrt{I_F(1 - I_F)} \sqrt{I_B} \sin(\theta_B - \theta_F),\end{aligned}\quad (\text{B21})$$

となる。量子化条件として、時間微分の状態期待値の部分から

$$S = \hbar \oint_C (I_B d\theta_B + I_F d\theta_F) = 2\pi \hbar n, \quad n = \text{integer} \quad (\text{B22})$$

が要請される。ここで

$$\oint_C I_F d\theta_F \equiv \Gamma_C, \quad (\text{B23})$$

とおくと、ボソン自由度に対する量子化条件として

$$\hbar \oint_C I_B d\theta_B = 2\pi \hbar \left(n - \frac{\Gamma_C}{2\pi} \right), \quad (\text{B24})$$

が得られ、 Γ_C すなわち I_F が“一般化された Berry の位相”の効果を表している。

さて、(B20) 式、(B21) 式において断熱近似に対応する解を探そう。これはすぐ後にわかることだが、得られた解でさらに近似をすることによって、通常の断熱位相が再現されるような解を意味している。次の解を得ることは容易である。

$$\theta_B = \theta_F \text{ (or } = \theta_F + \pi) \quad \text{and} \quad \frac{d\theta_B}{dt} = \frac{d\theta_F}{dt}. \quad (\text{B25})$$

ここで、第2式は正準方程式 (B20)、(B21) から

$$\hbar\omega \pm v \sqrt{I_F(1 - I_F)} \sqrt{\frac{1}{I_B}} = 2\epsilon \pm v \frac{1 - 2I_F}{\sqrt{I_F(1 - I_F)}} \sqrt{I_B} \quad \text{for} \begin{cases} \theta_B = \theta_F \\ \theta_B = \theta_F + \pi \end{cases} \quad (\text{B26})$$

と書き換えられる。この解は I_B 、 I_F が別々に保存されるような解であり、このことから (B22) 式は簡単に積分できて、

$$S = \hbar \oint (I_B d\theta_B + I_F d\theta_F) = 2\pi \hbar (I_B + I_F), \quad (\text{B27})$$

となる。すなわち量子化条件として

$$I_B + I_F = n, \quad n = \text{integer} \quad (\text{B28})$$

を得る。(B26) 式に種々の近似を当てはめてみよう。

(a) $\hbar\omega \ll 2\epsilon$ かつ $I_F \ll I_B$ の場合

この条件のもとでは (B26) 式において左辺を無視することができて

$$I_F = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{|\epsilon|}{\sqrt{\epsilon^2 + v^2 I_B}} \right), \quad (\text{B29})$$

と近似される。この結果は前節で導かれた通常の Berry の位相に他ならない。ここで $\hbar\omega \ll 2\epsilon$ は断熱近似が成り立つ条件であり、 $I_F \ll I_B$ は半古典近似が成り立つ条件と考えられる。

(b) $\hbar\omega \lesssim 2\epsilon$ かつ $I_F \ll I_B$ の場合

(a) で断熱近似が成り立つと考えられる条件のみをはずした近似である。(B26) 式の左辺において $\hbar\omega$ を残すと、(B29) 式は修正されて

$$I_F = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{|\epsilon - \frac{\hbar\omega}{2}|}{\sqrt{(\epsilon - \frac{\hbar\omega}{2})^2 + v^2 I_B}} \right). \quad (\text{B30})$$

となる。これは非摂動的に $\hbar\omega/2$ のダイナミカルな効果を取り込まれている拡張された Berry の位相である。

さらに、近似の精度をあげていくためには、(B26) 式を直接 (数値的に) 解けば良い。これにより正確なエネルギースペクトルが良く再現されることが確かめられる。

APPENDIX C. (1+1)-次元ソリトン模型

この Appendix では (1+1)-次元スカラー場のソリトン模型に対しての、スクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法の構成を与えておく。さらに、この場合の半古典極限もまた考察される。C.1 において (1+1)-次元スカラー場のソリトン模型で、スクイーズされたコヒーレント状態を構成する。C.2 では正準変数条件、及び時間依存変分原理を適用し、ソリトンと量子的揺らぎが結合した自己無撞着方程式を定式化する。C.3 において、この枠組みでの半古典極限を考察する。

C.1 場の理論におけるスクイーズされたコヒーレント状態の構成

場の演算子 $\phi(x)$ 、およびそれに共役な運動量演算子 $\pi(x)$ から成る系を考えよう。交換関係は $[\phi(x), \pi(y)] = i\delta(x-y)$ で、他の組は互いに可換である。この Appendix のみ $\hbar = 1$ の自然単位系を用いることにする。Schrödinger 表示の場の演算子を平面波で展開すると

$$\phi(x) = \sum_k \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}} [a_k e^{ikx} + a_k^\dagger e^{-ikx}], \quad (C1a)$$

$$\pi(x) = (-i) \sum_k \sqrt{\frac{\omega_k}{2}} [a_k e^{ikx} - a_k^\dagger e^{-ikx}], \quad (C1b)$$

である。ただし生成消滅演算子 a_k^\dagger, a_k はボソンの交換関係 $[a_k, a_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'}$, $[a_k, a_{k'}] = [a_k^\dagger, a_{k'}^\dagger] = 0$ を満足しており、自由ボソン質量 (free boson mass) を μ として $\omega_k = \sqrt{k^2 + \mu^2}$ とする。ここに $\omega_k = \omega_{-k}$ が満たされている。考察するハミルトニアンは

$$H_a = \int_{-\infty}^{\infty} dx : \left\{ \frac{1}{2} \pi(x)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi(x)}{\partial x} \right)^2 + U[\phi(x)] \right\} :_a, \quad (C2)$$

であり、ここに $: \cdot :_a$ はボソン演算子 a_k, a_k^\dagger について正規積 (normal ordering) をとることを意味する。(1+1)-次元スカラー場の理論は超繰り込み可能 (super renormalizable) であり、この正規積により理論の発散は除去されている。さらに、自己相互作用 $U[\phi(x)]$ は古典ソリトン解を持つものと仮定する。また一般性を失うこと無しに $U[\phi(x)]$ の絶対最小値を 0 としておく。

さて、時間依存変分法の枠組みにのせてかつ量子的揺らぎの効果まで取り込むために、変分試行関数としてスクイーズされたコヒーレント状態をとろう。

$$|\Phi(\alpha, \beta)\rangle = \exp\{\hat{S}(\alpha)\} \exp\{\hat{T}(\beta)\} |0\rangle. \quad (C3)$$

ここに

$$\hat{S}(\alpha) = \sum_k (\alpha_k a_k^\dagger - \alpha_k^* a_k), \quad (C4a)$$

$$\hat{T}(\beta) = \frac{1}{2} \sum_{kk'} (a_k^\dagger B_{kk'} a_{k'}^\dagger - a_k B_{kk'}^* a_{k'}), \quad (C4b)$$

である。 $\alpha_k, \alpha_k^*, B_{kk'}, B_{kk'}^*$ が時間依存の変数である。ただし対称行列 $B = (B_{kk'})$ と $\beta = (\beta_{kk'})$ の関係は

$$B = \beta \frac{\sinh^{-1}(\sqrt{2\beta^\dagger \beta})}{\sqrt{\beta^\dagger \beta}}, \quad \beta = \frac{1}{\sqrt{2}} B \frac{\sinh(\sqrt{B^\dagger B})}{\sqrt{B^\dagger B}}, \quad (C5)$$

と与えられる。実は $\beta_{kk'}$ が正準変数となっているのである。さて、このスクイーズされたコヒーレント状態は 2 章において示したと全く同様に、Balian-Brezin の公式³²⁾ を用いると、別の同値な形に変形することが可能である。すなわち、

$$|\Phi(\alpha, \beta)\rangle = e^{i\varphi} |\Phi(t)\rangle. \quad (C6)$$

ここに $|\Phi(t)\rangle$ は

$$|\Phi(t)\rangle = N(t) \exp\{S(t)\} \exp\{T(t)\} |0\rangle, \quad (C7)$$

ただし

$$S(t) = i \int_{-\infty}^{\infty} dx [D(x, t) \phi(x) - C(x, t) \pi(x)], \quad (C8a)$$

$$T(t) = \frac{1}{2} \int \int_{-\infty}^{\infty} dx dy \phi(x) \Omega(x, y, t) \phi(y), \quad (C8b)$$

と定義されている。ここで $C(x, t)$, $D(x, t)$ は

$$C(x, t) = \sum_k \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}} [\alpha_k e^{ikx} + \alpha_k^* e^{-ikx}] , \quad (C9a)$$

$$D(x, t) = (-i) \sum_k \sqrt{\frac{\omega_k}{2}} [\alpha_k e^{ikx} - \alpha_k^* e^{-ikx}] , \quad (C9b)$$

である。これらは (C1a), (C1b) 式の場の演算子 $\phi(x)$, $\pi(x)$ で、ボソン演算子 a_k , a_k^\dagger をそれぞれ c -数 α_k , α_k^* に置き換えた古典イメージとなっていることがわかる。後に理解されることであるが、この枠組みでの半古典極限をとることにより、 $C(x, t)$ は古典ソリトンプロフィール関数になる。さらに $\Omega(x, y, t)$ は行列 $I = (I_{kk'}) = (\delta_{kk'})$ として $\hat{\Omega}$, Ω を

$$\begin{aligned} \hat{\Omega} &= 2I \left[1 + B \frac{\tanh \sqrt{B^\dagger B}}{\sqrt{B^\dagger B}} I \right]^{-1} B \frac{\tanh \sqrt{B^\dagger B}}{\sqrt{B^\dagger B}} I \\ &\equiv (\Omega_{kk'} / \sqrt{\omega_k \omega_{k'}}) , \end{aligned} \quad (C10)$$

と定義したとき

$$\Omega(x, y, t) = \sum_{kk'} e^{-ikx} \Omega_{kk'} e^{-ik'y} , \quad (C11)$$

によって、もとの変数 $B_{kk'}$ と関係がついている。残りの位相因子 $e^{i\varphi}$ は

$$e^{i\varphi} = \left[\det \left\{ (1 - I \frac{\hat{\Omega}}{2})^{-1} (1 - I \frac{\hat{\Omega}}{2})^\dagger \right\} \right]^{-\frac{1}{4}} \quad (C12)$$

となることが示される。こうして状態 $|\Phi(\alpha, \beta)\rangle$ と $|\Phi(t)\rangle$ の同値性が示されたので、時間依存変分原理を考えるときの変分試行状態として、状態 $|\Phi(t)\rangle$ をとることにする。さらに $\Omega(x, y, t)$ を実部と虚部にわけておこう。

$$\Omega(x, y, t) = \frac{1}{2} \{ G_0^{-1}(x, y) - G^{-1}(x, y, t) \} + i2\Pi(x, y, t) . \quad (C13)$$

ここに $G_0(x, y)$ は後の便宜のために導入した既知関数であり、次のようにとられる。

$$G_0(x, y) = \langle 0 | \phi(x) \phi(y) | 0 \rangle = \sum_k \frac{1}{2\omega_k} e^{ik(x-y)} . \quad (C14)$$

定義から $G_0(x, y)$, $G(x, y, t)$, $\Pi(x, y, t)$ は実関数であり引数 x , y の入れ替えに対して対称関数、すなわち $G(x, y, t) = G(x, y, t)^* = G(y, x, t)$ 等が満たされている。このとき、(C7)

式中の規格化因子は

$$\begin{aligned} N(t)^2 &= \det \left[1 - \frac{1}{2} (I \hat{\Omega} + \hat{\Omega}^\dagger I) \right]^{1/2} \\ &= \det (I G_0 G^{-1})^{1/2} \end{aligned} \quad (C15)$$

と書けている。こうしてスクイーズされたコヒーレント状態と同値な変分試行関数として $|\Phi(t)\rangle$ をとる際に、時間依存変数は α_k , α_k^* , $B_{kk'}$, $B_{kk'}^*$ から $C(x, t)$, $D(x, t)$, $G(x, y, t)$, $\Pi(x, y, t)$ に変換されることになった。

C.2 正準変数条件と時間依存変分原理

変分試行状態が構成され、時間依存変分関数として $C(x, t)$, $D(x, t)$, $G(x, y, t)$, $\Pi(x, y, t)$ がとられることとなった。これらの時間発展を決定すれば状態 $|\Phi(t)\rangle$ の時間発展が決まる。これは2章と同様時間依存変分原理により決定される。

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt \langle \Phi(t) | i \frac{\partial}{\partial t} - H_a | \Phi(t) \rangle = 0 . \quad (C16)$$

種々の期待値も Balian-Brezin の公式を利用することによって計算される。例えば、場の演算子の期待値は $\langle \Phi(t) | \phi(x) | \Phi(t) \rangle = C(x, t)$, $\langle \Phi(t) | \phi(x) \phi(y) | \Phi(t) \rangle = C(x, t) C(y, t) + G(x, y, t)$ といった具合である。このように $G(x, y, t)$ は場の演算子の c -数期待値 $C(x, t)$ が存在するもとの2点関数であると言える。さらに正準変数条件が課され、理論が正準形式に定式化されることも2章と同様である。正準変数条件の可能な解の組として $(C(x, t), D(x, t))$, $(G(x, y, t), \Pi(x, y, t))$ をとることができる。陽に書くと

$$\langle \Phi(t) | i \delta_{C(x, t)} | \Phi(t) \rangle = \frac{1}{2} D(x, t) , \quad \langle \Phi(t) | i \delta_{D(x, t)} | \Phi(t) \rangle = -\frac{1}{2} C(x, t) , \quad (C17)$$

$$\langle \Phi(t) | i \delta_{G(x, y, t)} | \Phi(t) \rangle = 0 , \quad \langle \Phi(t) | i \delta_{\Pi(x, y, t)} | \Phi(t) \rangle = -G(x, y, t) . \quad (C18)$$

ここで $\delta_{X(u_1, u_2, \dots)}$ は関数 $X(u_1, u_2, \dots)$ についての汎関数微分を示す。こうして、得られる運動方程式は正準方程式にほかならず、

$$\dot{C}(x, t) = \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta D(x, t)} , \quad \dot{D}(x, t) = -\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta C(x, t)} , \quad (C19)$$

$$\dot{G}(x, y, t) = \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \Pi(x, y, t)} , \quad \dot{\Pi}(x, y, t) = -\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta G(x, y, t)} , \quad (\text{C20})$$

となる。ここにドットは時間微分を表す。エネルギー汎関数 \mathcal{H} はハミルトニアン演算子のスクイーズされたコヒーレント状態期待値として

$$\mathcal{H} \equiv \langle \Phi(t) | H_a | \Phi(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \mathcal{E}(x) . \quad (\text{C21})$$

ここにエネルギー密度として

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(x) = & \frac{1}{2} D(x, t)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial C(x, t)}{\partial x} \right)^2 + \mathcal{M}^{(0)}[C(x, t)] \\ & + \frac{1}{8} \langle x | G^{-1}(t) | x \rangle + 2 \langle x | \Pi(t) G(t) \Pi(t) | x \rangle + \frac{1}{2} \lim_{y \rightarrow x} \nabla_x \nabla_y \langle x | G(t) | y \rangle \\ & - \frac{1}{8} \langle x | G_0^{-1} | x \rangle - \frac{1}{2} \lim_{y \rightarrow x} \nabla_x \nabla_y \langle x | G_0 | y \rangle . \end{aligned} \quad (\text{C22})$$

ただし記法として

$$\langle x | G(t) | y \rangle = G(x, y, t) , \quad (\text{C23a})$$

$$\langle x | \Pi(t) G(t) \Pi(t) | y \rangle = \int \int_{-\infty}^{\infty} dx' dy' \Pi(x, x', t) G(x', y', t) \Pi(y', y, t) , \quad (\text{C23b})$$

および $\nabla_x \langle x | G(t) | y \rangle = \partial G(x, y, t) / \partial x$ 等を用いた。また、 $\mathcal{M}^{(n)}[C(x, t)]$ は次のように定義されたものである。

$$\mathcal{M}^{(n)}[C(x, t)] = \exp \left\{ \frac{1}{2} \Delta(x, t) \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\} U^{(n)}(z) \Big|_{z=C(x, t)} . \quad (\text{C24})$$

かつ

$$\Delta(x, t) = G(x, x, t) - G_0(x, x) . \quad (\text{C25})$$

$U^{(n)}(z)$ は $U(z)$ の c 数の引数 z についての n 階微分である。エネルギー密度 (C22) 式で、第1行目は大雑把に言ってソリトンによるエネルギーへの寄与である。第2行目は量子的揺らぎの効果であり、第3行目はこの項に現れる発散を除去する相殺項の役割をする。もちろんこの枠組みではソリトンとメソン場の量子的揺らぎは自己無撞着に決定される扱いであるので、“古典ソリトン” “量子的揺らぎ” という用語は文字通りの意味ではないことに注意しておこう。

運動方程式 (C19) を書き下すと

$$\dot{D}(x, t) = \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} - \mathcal{M}^{(1)}[C(x, t)] , \quad (\text{C26a})$$

$$\dot{C}(x, t) = D(x, t) . \quad (\text{C26b})$$

さらに函数 $D(x, t)$ を消去することにより結果となる運動方程式は簡単に

$$\frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} + \mathcal{M}^{(1)}[C(x, t)] = 0 , \quad (\text{C27})$$

となる。この方程式は“変更されたソリトン方程式”と考えられる。いま、 $\mathcal{M}^{(1)}[C(x, t)]$ 中に現れる $\Delta(x, t)$ は本来常に \hbar に伴われたループの効果を表していることに注意しよう。実際、 $\langle \Phi(t) | \phi(x) | \Phi(t) \rangle = C(x, t)$ 、 $\langle \Phi(t) | \phi(x) \phi(y) | \Phi(t) \rangle = C(x, t) C(y, t) + G(x, y, t)$ から、 $G(x, y, t)$ は、ソリトン $C(x, t)$ の存在のために変化を受けた真空である“スクイーズされた真空” $|\Psi(t)\rangle = N(t) \exp \{T(t)\} |0\rangle$ のまわりでのボソン伝播函数に対応していることがわかる。実際、 $\langle \Psi(t) | \phi(x) \phi(y) | \Psi(t) \rangle = G(x, y, t)$ となっている。 $\mathcal{M}^{(1)}[C(x, t)]$ はボソン伝播函数 $G(x, x, t)$ に指数函数的に依存しているので、(C27) 式には多ループの効果が自己相互作用部分を通して取り込まれていることになっている。このときこの枠組みでの半古典極限、すなわち $\hbar \rightarrow 0$ をとると、そのとき $\mathcal{M}^{(1)}[C(x, t)]$ は $(\delta U / \delta C)|_{C=C(x, t)}$ に帰着することがわかる。こうして (C27) 式は良く知られた古典ソリトン方程式⁶¹⁾ に帰着されることがわかる。したがって、 $C(x, t)$ はソリトンプロファイル函数に他ならない。

同様にして (C20) 式を書き下すと

$$\begin{aligned} \left\{ -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \mathcal{M}^{(2)}[C(x, t)] \right\} G(x, y, t) = & \frac{1}{4} \langle x | G^{-1}(t) | y \rangle - 2 \langle x | \dot{\Pi}(t) G(t) | y \rangle \\ & - 4 \langle x | \Pi(t)^2 G(t) | y \rangle , \end{aligned} \quad (\text{C28a})$$

$$\dot{G}(x, y, t) = 2 \left\{ \langle x | G(t) \Pi(t) | y \rangle + \langle x | \Pi(t) G(t) | y \rangle \right\} . \quad (\text{C28b})$$

ただし (C28a) 式を得るために (C20) 第2式で右から $G(y, z, t)$ をかけ、 y -積分を実行したあと z を y と書きなおした。これらの運動方程式 (C27)、(C28) 式は変更されたポテンシャル項 $\mathcal{M}^{(1)}[C(x, t)]$ および $\mathcal{M}^{(2)}[C(x, t)]$ を通して互いに結合した方程式であり、したがってソリ

トンプロフィール函数 $C(x, t)$, また $D(x, t)$, そして量子的揺らぎ $G(x, y, t)$, $\Pi(x, y, t)$ は自己無撞着に決定されるべき量である。これは、量子的揺らぎが小さくなく、揺らぎが線型化できないような状況の記述を可能としている。(1+1)-次元スカラー場のソリトンモデルでは \hbar が小さい、すなわち半古典的記述が良いことは弱結合 (weak coupling) に対応しており、したがって必ずしも coupling が弱くないときには半古典近似も破綻する。このときにはソリトンと量子的揺らぎは自己無撞着に決まるべきであり、ここでの扱いはソリトンと量子的揺らぎを変分的に決めて \hbar の高次の効果まで含んでいるので、弱結合に限らない状況でのソリトン系の記述を可能にしているのである。

C.3 半古典極限

ここから、静的な問題に限って考察を進めよう。この場合には $\dot{G}(x, y, t) = 0$ で $\Pi(x, y, t) = 0$ となる。このとき (C28a) 式は簡単に

$$\left\{ -\nabla_x^2 + \mathcal{M}^{(2)}[C(x)] \right\} \langle x | G | y \rangle = \frac{1}{4} \langle x | G^{-1} | y \rangle \quad (\text{C29})$$

と書け、変更されたソリトン方程式 (C27) 式は次の形に帰着される。

$$-\frac{d^2 C(x)}{dx^2} + \mathcal{M}^{(1)}[C(x)] = 0 \quad (\text{C30})$$

これらの方程式は静的な場合のソリトンとメソンによる量子的揺らぎの自己無撞着方程式である。この枠組みでの半古典極限は本文 3 章と同様に運動方程式段階での $\hbar \rightarrow 0$ として構成される。このとき量子的揺らぎを示す運動方程式が通常の WKB 法の安定性方程式 (stability equation) に帰着することを見るために、さらにボソン伝播函数であった $\langle x | G | y \rangle$ を次のように展開しよう。

$$\langle x | G | y \rangle = \sum_{\alpha} \frac{1}{2\epsilon_{\alpha}} \xi_{\alpha}(x) \xi_{\alpha}^*(y) \quad (\text{C31})$$

ここで“0-固有値”は無いと仮定 ($\epsilon_{\alpha} \neq 0$) し、⁶²⁾ $\{\xi_{\alpha}(x)\}$ は規格直交完全系であるとする。すなわち $\int dx \xi_{\alpha}^*(x) \xi_{\beta}(x) = \delta_{\alpha\beta}$ かつ $\sum_{\alpha} \xi_{\alpha}(x) \xi_{\alpha}^*(y) = \delta(x-y)$ 。こうして (C29) 式は

“変更された安定性方程式 (modified stability equation)” とみなされる。

$$\left\{ -\frac{d^2}{dx^2} + \mathcal{M}^{(2)}[C(x)] \right\} \xi_{\alpha}(x) = \epsilon_{\alpha}^2 \xi_{\alpha}(x) \quad (\text{C32})$$

ここで関係式 $\langle x | G^{-1} | y \rangle = \sum_{\alpha} 2\epsilon_{\alpha} \xi_{\alpha}(x) \xi_{\alpha}^*(y)$ を用いた。先にも指摘されたように、この枠組みでの半古典極限をとることにより $\mathcal{M}^{(n)}[C(x)]$ は $(\delta^n U / \delta C^n)|_{C=C(x)}$ に帰着され、(C30), (C32) 式はそれぞれ古典ソリトン方程式、および WKB 法での安定性方程式^{36), 61)} に帰着していることが理解される。こうして、(1+1)-次元スカラー場のソリトン模型に対する、スクイーズされたコヒーレント状態を用いた時間依存変分法では、WKB 近似との対応は直接的に示されることがわかる。また半古典極限を取らなければ、自己相互作用項 $\mathcal{M}^{(n)}[C(x, t)]$ を通じて高次のループ補正が取り込まれているので、この枠組みでは WKB 近似を越えた扱いになっていることが理解されるであろう。こうして、ソリトン・ソリトン散乱等にこのアプローチを用いることにより、WKB 近似を越えて量子効果を取り込んだ記述が可能であることが期待され、そのときに量子効果の発現によりソリトン間ポテンシャルがどの様に変更されるかといった興味ある課題に 1 つの知見を与え得ると期待される。

REFERENCES

- 1) L. G. Yaffe, Rev. Mod. Phys. **54** (1982), 407.
- 2) E. Witten, Nucl. Phys. **B160** (1979), 57.
- 3) I. Zahed and G. E. Brown, Phys. Rep. **142** (1986), 1, and references therein.
- 4) T. S. Walhout and J. Wambach, Phys. Rev. Lett. **67** (1991), 314.
- 5) A. Hosaka, S. M. Griffies, M. Oka and R. D. Amado, Phys. Lett. **251B** (1990), 1.
- 6) T. Otofujii, Y. Kondo, S. Saito and R. Seki, Phys. Rev. **D45** (1992), 2528.
- 7) R. D. Amado, H. Liu, M. Oka and E. Wong, Phys. Rev. Lett. **63** (1989), 852.
- 8) M. Oka, H. Liu and R. D. Amado, Phys. Rev. **C39** (1989), 2317.
- 9) M. Oka, Phys. Rev. Lett. **66** (1991), 1019.
- 10) M. Yamamura and A. Kuriyama, Prog. Theor. Phys. Suppl. No.93 (1987), and references therein.
- 11) For example, P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem* (Springer-Verlag, New York, 1980).
- 12) P. M. Stevenson, Phys. Rev. **D32** (1985), 1389.
- 13) For example, P. Kramer and M. Saraceno, *Geometry of the Time-Dependent Variational Principle in Quantum Mechanics*, Lecture Notes in Physics **140** (Springer-Verlag, Berlin, 1981).
- 14) W.-M. Zhang, D. H. Feng and R. Gilmore, Rev. Mod. Phys. **62** (1990), 867.
- 15) T. Marumori, A. Hayashi, T. Tomoda, A. Kuriyama and T. Maskawa, Prog. Theor. Phys. **63** (1980), 1576.

- 16) T. Marumori, T. Maskawa, F. Sakata and A. Kuriyama, Prog. Theor. Phys. **64** (1980), 1294.
- 17) M. Matsuo and K. Matsuyanagi, Prog. Theor. Phys. **74** (1985), 288.
- 18) H. Fukutome, Prog. Theor. Phys. **80** (1988), 417; **81** (1989), 342.
- 19) S. Nishiyama and H. Fukutome, Prog. Theor. Phys. **85** (1991), 1211; **86** (1991), 371.
- 20) F. Cooper, S.-Y. Pi and P. N. Stancioff, Phys. Rev. **D34** (1986), 3831.
- 21) U. Kaulfuss and M. Altenbokum, Phys. Rev. **D35** (1987), 609.
- 22) M. Funke, U. Kaulfuss and H. Kümmel, Phys. Rev. **D35** (1987), 621.
- 23) I. Stancu and P. M. Stevenson, Phys. Rev. **D42** (1990), 2710.
- 24) R. Jackiw and A. Kerman, Phys. Lett. **71A** (1979), 158.
- 25) Y. Tsue, Y. Fujiwara, A. Kuriyama and M. Yamamura, Prog. Theor. Phys. **85** (1991), 693.
- 26) Y. Tsue and Y. Fujiwara, Prog. Theor. Phys. **86** (1991), 443.
- 27) Y. Tsue and Y. Fujiwara, Prog. Theor. Phys. **86** (1991), 469.
- 28) D. Huber and E. J. Heller, J. Chem. Phys. **87** (1987), 5302.
- 29) D. Huber, E. J. Heller and R. G. Littlejohn, J. Chem. Phys. **89** (1988), 2003.
- 30) R. G. Littlejohn, Phys. Rev. Lett. **61** (1988), 2159.
- 31) T. Fukui and Y. Tsue, Prog. Theor. Phys. **87** (1992), 627.
- 32) R. Balian and E. Brezin, Nuovo Cimento **64B** (1969), 37.
- 33) M. Yamamura, A. Kuriyama and Y. Tsue, Prog. Theor. Phys. **88** (1992), 719.
- 34) D. F. Walls, Nature (London) **306** (1983), 141, and references therein.
- 35) K. Takahashi, Prog. Theor. Phys. Suppl. No.98 (1989), 109.

- 36) R. F. Dashen, B. Hasslacher and A. Neveu, Phys. Rev. **D10** (1974), 4114, **D11** (1975), 3424.
- 37) S. Levit, J. W. Negele and Z. Paltiel, Phys. Rev. **C21** (1980), 1603.
- 38) J. P. Blaizot and H. Orland, Phys. Rev. **C24** (1981), 1740.
- 39) H. Kuratsuji and T. Suzuki, Phys. Lett. **92B** (1980), 19 ;
Prog. Theor. Phys. Suppl. Nos.74 and 75 (1983), 209.
- 40) K.-K. Kan, J. J. Griffin, P. C. Lichtner and M. Dworzecka, Nucl. Phys. **A332** (1979), 109
- 41) K.-K. Kan, Phys. Rev. **C24** (1981), 279.
- 42) M. V. Berry, Proc. R. Soc. London **A392** (1984), 45.
- 43) *Geometric Phases in Physics*, ed. A. Shapere and F. Wilczek (World Scientific, Singapore, 1989).
- 44) H. Kuratsuji, Phys. Rev. Lett. **61** (1988), 1687.
- 45) J. M. Robbins and R. G. Littlejohn, Phys. Rev. Lett. **58** (1987), 1388.
- 46) R. G. Littlejohn and J. M. Robbins, Phys. Rev **A36** (1987), 2953.
- 47) S. C. Creagh, J. M. Robbins and R. G. Littlejohn, Phys. Rev. **A42** (1990), 1907.
- 48) M. V. Berry and K. E. Mount, Rep. Prog. Phys. **35** (1972), 315.
- 49) M. C. Gutzwiller, J. Math. Phys. **8** (1967), 1979.
- 50) J. Kurchan, P. Leboeuf and M. Saraceno, Phys. Rev. **A40** (1989), 6800.
- 51) A. Voros, Phys. Rev. **A40** (1989), 6814.
- 52) J. M. Robbins, private communication.
M. V. Berry, Lecture given at the Ferrara School of Theoretical Physics on "Anomalies, defects, phases...." In *Anomalies, phases, defects*, ed. M. Bregola, G. Marmo and G. Morandi, (1990) 125. Naples : Bibliopolis.

- 53) J. M. Robbins, Nonlinearity **4** (1991), 343.
- 54) M. Combescure, J. Math. Phys. **33** (1992), 3870.
- 55) *Chaos and Quantum Physics*, ed. M.-J. Giannoni, A. Voros and J. Zinn-Justin, *Les Houches LII* (North-Holland, Amsterdam, 1991).
- 56) M. Yamamura and A. Kuriyama, private communication.
- 57) H. Kuratsuji and S. Iida, Prog. Theor. Phys. **74** (1985), 439.
- 58) K. Yabana and H. Horiuchi, Prog. Theor. Phys. **75** (1986), 592 ; **77** (1987), 517.
- 59) R. G. Littlejohn and W. G. Flynn, Phys. Rev. Lett. **66** (1991), 2839 ;
Phys. Rev. **A44** (1991), 5239 ; **A45** (1992), 7697.
- 60) T. Fukui, Prog. Theor. Phys. **87** (1992), 927.
- 61) See, for example, R. Rajaraman, *Solitons and Instantons* (North-Holland, Amsterdam, 1982).
- 62) M. Altenbokum, U. Kaulfuss and J. J. M. Verbaarschot, Phys. Rev. **D34** (1986), 1840.

FIGURE CAPTIONS

1. $G(t)$, $\Pi(t)$ の初期条件の選択に対する妥当性が Morse ポテンシャル $V(Q) = W_0(e^{-2\mu Q} - 2e^{-\mu Q})$ の場合に示される。パラメーターは, $W_0 = 1.0$, $\mu = 0.1$ にとられ, $p(t)$, $q(t)$ に対する初期値は 0 にとられている。省略語 *L.Q.E.*, *M.U.* はそれぞれ *Least Quantal Effects*, *Minimal Uncertainty* という初期条件に対する要求が満たされていることを示す。Exact は, 正確な基底状態エネルギー固有値を示す。
2. $G(t)$ - $\Pi(t)$ の位相空間の軌跡が, Eckart ポテンシャル $V(Q) = -U_0/\cosh^2 \alpha Q$ の場合に運動方程式を数値的に解くことにより示されている。パラメーターは $U_0 = 1$, $\alpha = 0.1$ にとられている。 $q(t)$, $p(t)$ に対する初期値は 0 にとられている。
3. 基底状態エネルギーが Eckart ポテンシャルの場合に示されている。“This Case” はスクイーズされたコヒーレント状態によるアプローチで数値的に得られたエネルギーを示す。 q , p に対する初期値は $q_0 = p_0 = 0$ にとられている。“WKB” と “Exact” はそれぞれ基底状態の通常の WKB 近似により得られるエネルギーおよび正確なエネルギー期待値を示している。

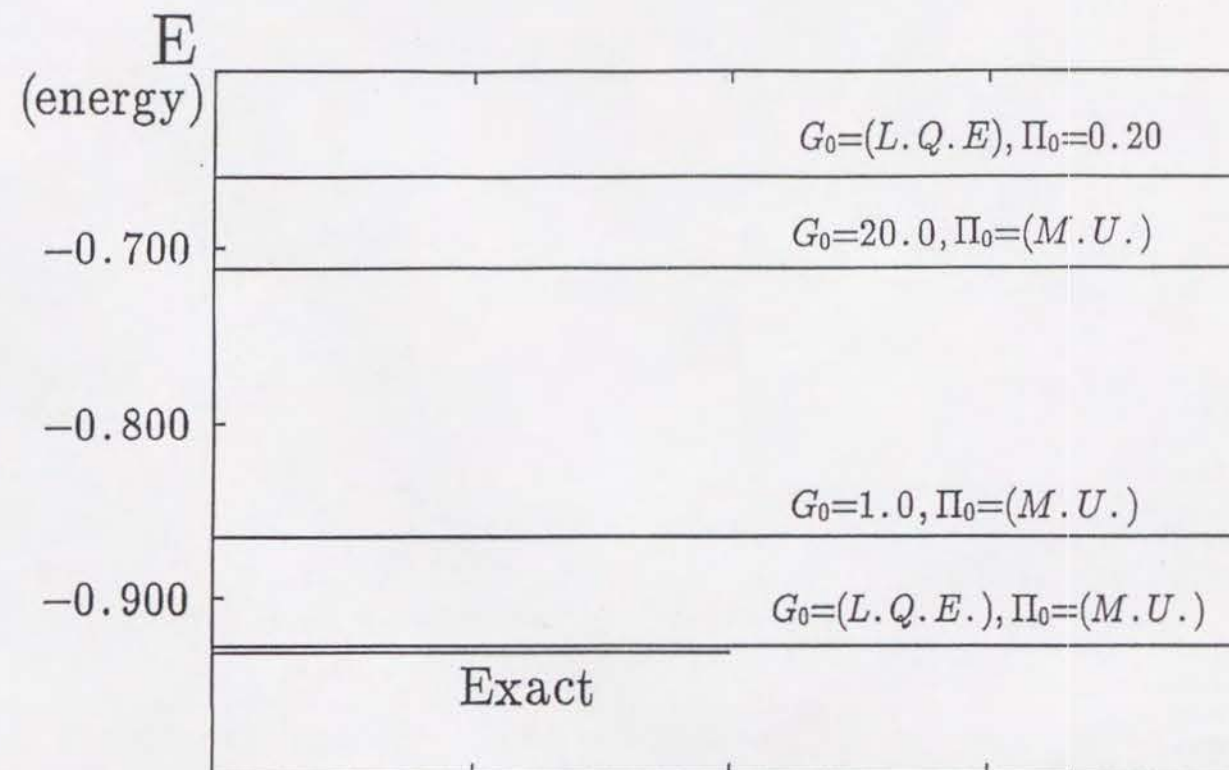


Fig. 1

ECKART G- Π

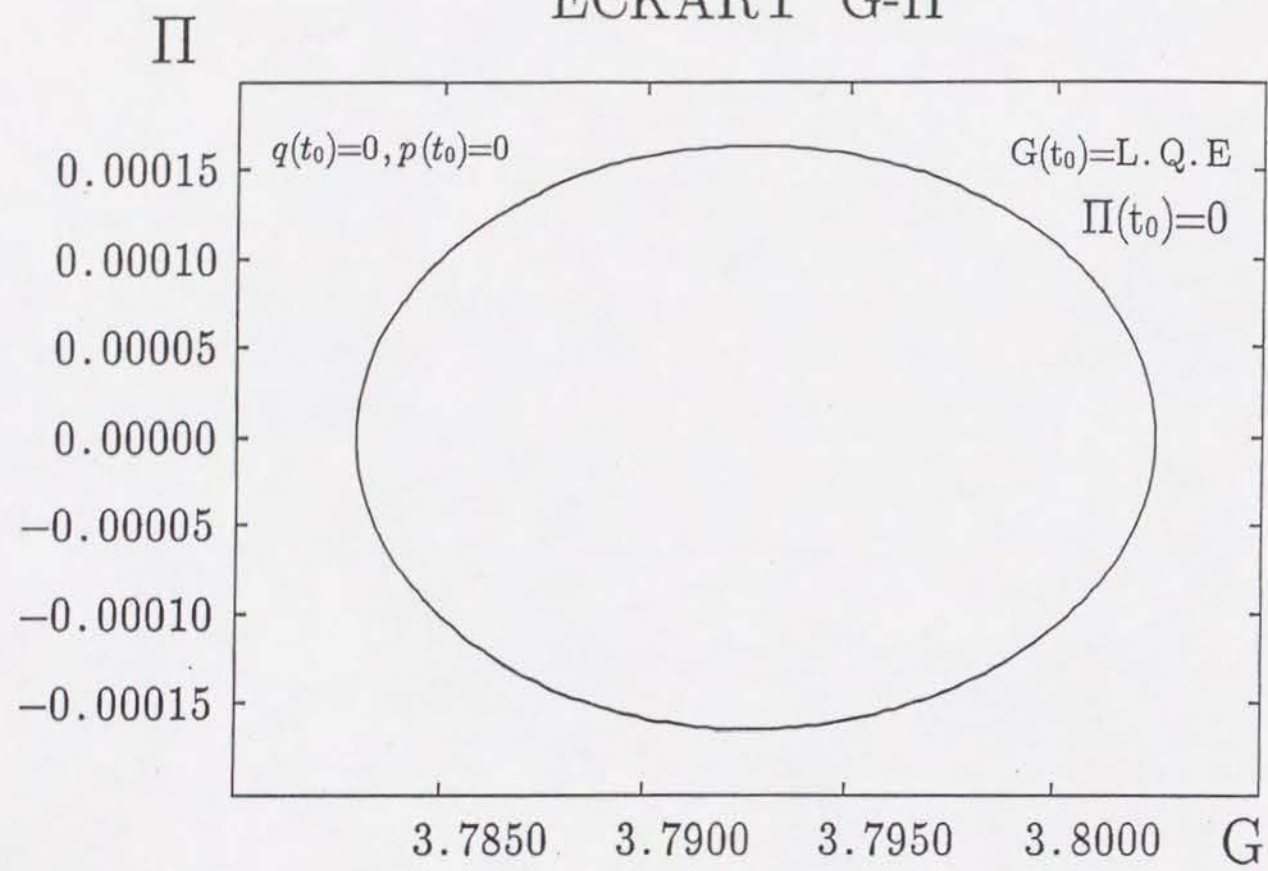


Fig. 2

ECKART

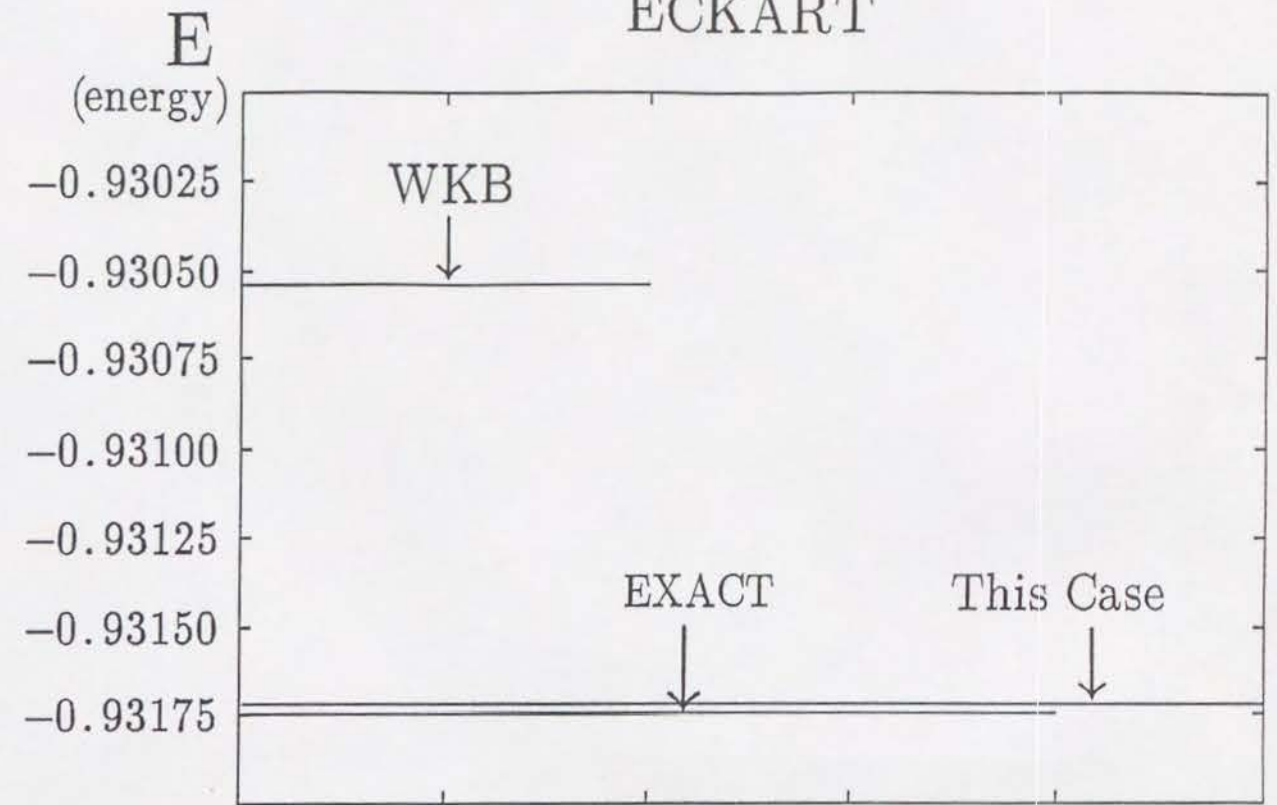


Fig. 3